

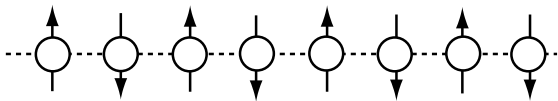
学位論文  
低次元モット絶縁体における光吸収スペクトル

伊東 久  
奈良先端科学技術大学院大学  
物質創成科学研究科  
2006年 3月

# 目次

第 1 章	序章	1
第 2 章	モデル, 解析方法	6
2.1	拡張ハバードハミルトニアンと 電子光子相互作用ハミルトニアン	6
2.2	有効ハミルトニアン	8
2.3	解析方法	13
2.3.1	光吸収スペクトル	13
2.3.2	自由誘導減衰 (FID)	13
2.3.3	ランチョス法	14
2.3.4	相関関数	15
2.3.5	有効ハミルトニアンの妥当性	17
第 3 章	光吸収スペクトルの解析	19
3.1	ハバードモデルにおける有効ハミルトニアンを用いた解析	19
3.1.1	強相関領域	19
3.1.2	比較的相関の弱い領域	29
3.1.3	1次元系	34
3.2	電荷束縛効果 (拡張ハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニ アンを用いた解析)	38
3.2.1	強相関領域	38
3.2.2	比較的相関の弱い領域	44
3.2.3	1次元系	48
第 4 章	結論	53
付録 A		55
A.1	2次元系	55
A.2	1次元系	55
付録 B	ランチョス法による吸収強度の計算方法	56
B.1	ランチョス法	56
B.2	スペクトル関数	57

# 第1章 序章

低次元強相関電子系は電子間の強い相関効果により高温超伝導 [1]、巨大な非線形光学感受率 [2–8]、極めて速い緩和 [2,3] などの様々な特異な性質を示す。このような特異な性質を示す低次元強相関電子系の特徴を理解するために、各原子が1つの価電子を持っており、各サイトに電子が1個ある half-filling の場合を考察してみる。この場合はバンド理論ではバンドが部分的に占有されて系は金属になる。しかしながら、低次元強相関電子系においては、同一サイト上に電子が存在した場合の強いクーロン斥力エネルギーを避けるために電子は局在化する。Fig.1.1 の  は原子を表し、矢印は各電子のスピンを表す。局在化した場合には、電子が隣りのサイトに遷移するためには巨大なエネルギーが必要であり、系は絶縁体となる [9,10]。この絶縁体はモット絶縁体と呼ばれる。モット絶縁体の光学ギャップは強い相関効果によって生じており、通常の半導体や絶縁体の光学ギャップとはその起源が本質的に異なっている。その結果、モット絶縁体における光励起状態は、一般的なバンド絶縁体のそれとは本質的に異なった性質を持つと考えられる。それゆえ低次元モット絶縁体における光学特性は、低次元強相関物質における電子相関効果やエキゾチックな性質に関する重要な情報をもたらしてくれると期待される。

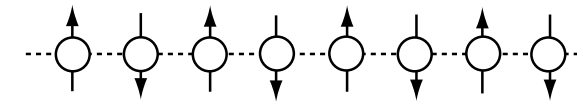


Fig. 1.1. 局在化した電子における反強磁性 (AF) 秩序の模式図。

光励起状態においては正負の電荷が同時に生成される。このために、光励起状態を考察する際には、正負の電荷間に働く引力クーロン相互作用による電荷束縛効果を考慮することが重要となる。実際、一般的なバンド半導体における主要な光学的性質は電荷束縛効果を取り入れた Wannier-Mott exciton 理論 [11] によって説明することができる。さらに近年、低次元モット絶縁体においても電荷束縛効果の重要性が指摘されている [12–15]。しかしながら、モット絶縁体における光励起された電荷の物理的な特性は、強い相関効果の結果、一般的なバンド絶縁体における電荷 (励起電子やホール) の性質と本質的に異なっている [10]。

この点について以下に説明する。ほとんどのモット絶縁体は交換相互作用のために反強磁性磁気秩序を持つ。この反強磁性モット絶縁体にドーピングなどにより電荷を注入した場合を考える。Fig.1.2 は1次元反強磁性モット絶縁体に電子を抜き去った場合を模式的に表し、Fig.1.3 は電子を付け加えた場合を模式的に表す。1サイトに1電子が局在してる場合は電氣的に中性であり、正の電荷は電子が抜けた空サイト、負の電荷は電子が追加された2重占有サイトにある。通常の半導体における荷電キャリアである励起電子やホールは、スピンと電荷をともに持ち、スピンと電荷は不可分となっている。Fig.1.2 および 1.3 からわかるように、モット絶縁体における荷電キャリア

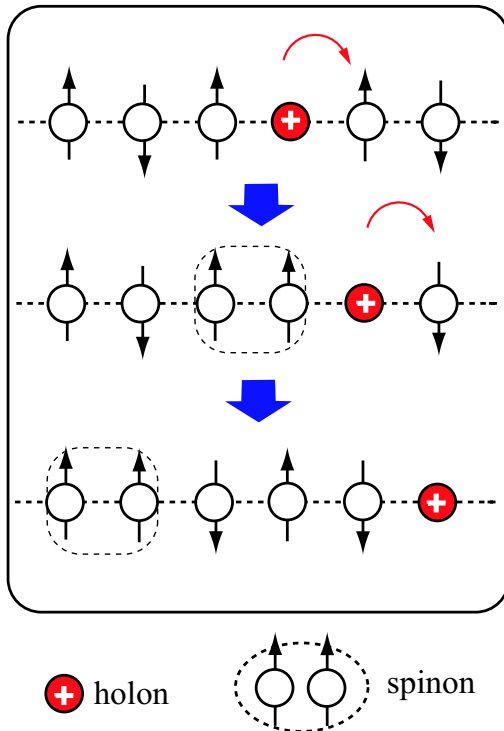


Fig. 1.2. ドープされたホロンの運動の模式図。

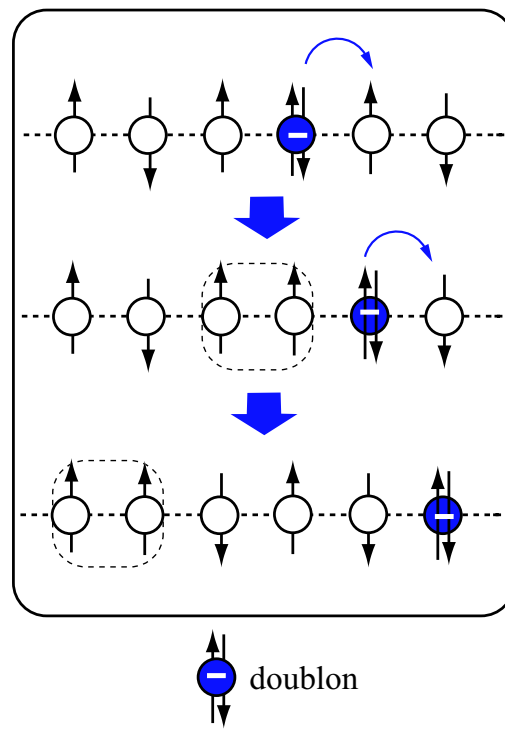


Fig. 1.3. ドープされたダブルロンの運動の模式図。

は、電荷を持つがスピンを持たない。このような正負の電荷はそれぞれホロンおよびダブルロンと呼ばれる。さらに、この図からわかるように、ホロンは、隣の電子が玉突き状にホロンがあったサイトに遷移することにより、ダブルロンはダブルロン上の電子が次々と隣のサイトに遷移することにより、移動することができる。1次元系においては、これらの図からわかるように、ホロンとダブルロンは反強磁性磁気秩序を乱すことなく移動できる。また、最初の移動によってスピンの triplet pair が生じる。このスピン励起は、スピンを持つが電荷はもたず、スピノンと呼ばれる。このスピノンも、スピンフリップによって反強磁性磁気秩序を乱すことなく移動することができる。このようにして、1次元系ではスピン励起と電荷が独立に運動できると予想される。この性質をスピンと電荷自由度の分離（スピン・電荷分離）と呼ぶ。現実の1次元モット絶縁体で、スピン・電荷分離が成立するかは自明ではない。なぜならば、Fig.1.2 および 1.3 では反強磁性磁気秩序における量子揺らぎを考察しておらず、大幅な単純化がなされているからである。このような特異な性質から、低次元強相関電子系の電荷を、ホールや励起電子によって記述することは適当ではない。ホロンとダブルロン [10, 16] によって記述するほうがより適している。それゆえ、今後は空サイトおよび2重占有サイトをそれぞれ、ホロンおよびダブルロンという用語を用いて記述する。しかしながら、この用語を用いても、そのことで完全にスピン・電荷分離が成立しているということを主張しているわけではない。

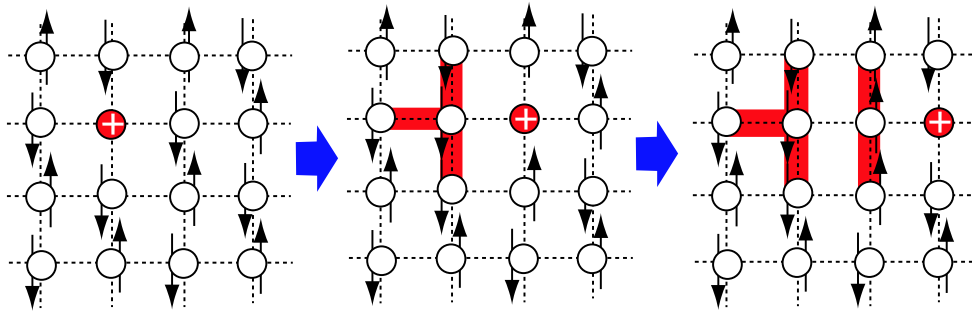


Fig. 1.4. 2次元系にドーブされたホロンの運動の模式図。

2次元系においては、Fig.1.4からわかるように、電荷の移動によって反強磁性磁気秩序は破壊される。このことからスピン・電荷分離が成立していないことがわかる。しかしながら、電荷とスピン励起が異なる場所に存在しており、分離しかけたスピン励起と電荷が引力により結合しているという見方もできる。近似的にスピン・電荷分離が成立し、このような電荷とスピンの自由度間の特異な相互作用が2次元強相関電子系の特異な性質の起源であるという考えもある。この電荷の性質とスピンとの結合は、低次元強相関電子系の性質を理解する重要な鍵となっている。

電荷束縛効果に話を戻す。電荷の特異な性質のために、低次元モット絶縁体における電荷束縛効果は、単純なエキシトンの理論では説明することはできない。特に、通常のバンド絶縁体中のエキシトンは基本的に電子とホール間の2体問題として理解できるのに対して、低次元強相関電子系における電荷の運動は全系におけるスピン自由度と相関があることは重要である。光励起された電荷とスピンとの間の相互作用はモット絶縁体の光学特性を理解するための鍵ともなっている。

1次元モット絶縁体における光吸収スペクトルに関して、多くの研究がなされてきた。最近接サイト間の電子の遷移（遷移積分を  $-t$  とする）および同一サイト上の電子間クーロン相互作用（相互作用エネルギーを  $U$  とする）のみが取り入れたハバードモデルは、低次元強相関電子系を記述する標準的なモデルとして広く認められている。このハバードモデルにおいて、 $U/t$  が大きい場合には幅広いスペクトルが得られるが、 $U/t$  が小さくなるにつれてスペクトル幅がより狭くなるのが、明らかにされた [17]。電荷束縛効果に関しては、ハバードモデルに最近接クーロン相互作用（相互作用エネルギーを  $V$  とする）を加えた拡張ハバードモデルにおいて [18-21]、および  $U/t$  が極めて大きい場合に成り立つ拡張ハバードモデルの有効ハミルトニアンを用いて [22-24]、 $V/t \geq 2$  おいて正負の電荷が束縛したエキシトンの状態が存在し、この電荷束縛状態が基底状態からの遷移モーメントをほぼ独占することが明らかにされた。この電荷束縛状態の存在は、光吸収スペクトル以外の物理量の解析からも明らかになっている [25-29]。また、非線形光学感受率などの別のテーマの研究との関連で、いくつかの論文において1次元モット絶縁体における光吸収スペクトルが求められている [30-32]。

2次元強相関電子系においてはスピンと電荷の自由度は完全には分離しておらず、この2つの自由度間の相互作用が2次元強相関電子系における様々な特異な性質の起源ではないかと考えられている。2次元モット絶縁体における光吸収スペクトルにそ

これらの相互作用の効果が顕著に現れることが期待できる。2次元モット絶縁体における光吸収スペクトルの理論的研究はいくつかのグループによって2次元ハバードもしくは強相関極限でのハバードモデルを用いて研究がなされている [33–40]。しかしながら、これらの研究の主なターゲットはキャリアをドーブした場合の低エネルギー側の光学伝導度や Drude ピークであり、モット絶縁体における光励起状態ではない。また、電荷束縛効果についての研究はまだなされていない。さらにまた、光吸収スペクトルにおけるスピンと電荷の相互作用や電荷束縛効果についてはよく理解できていない。

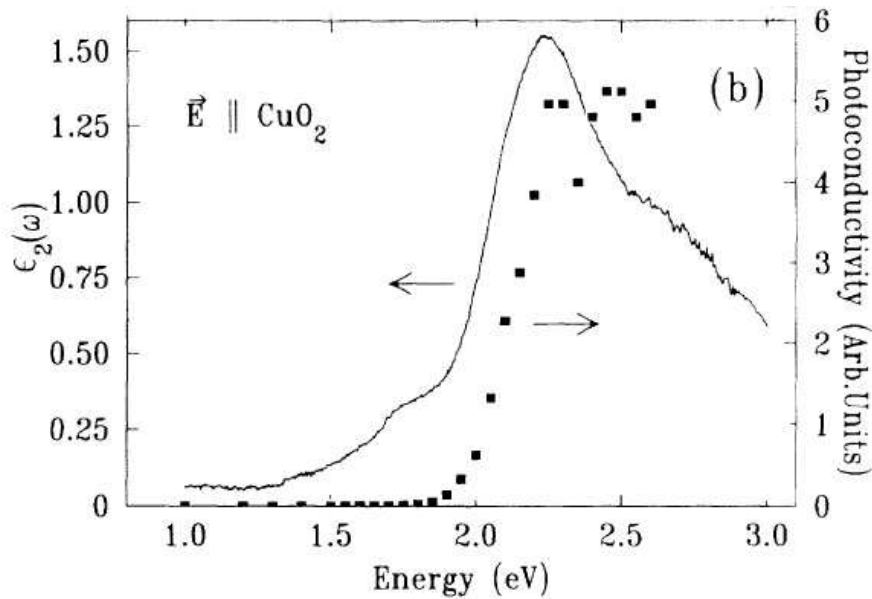


Fig. 1.5.  $T = 122K$  での  $\epsilon_2(\omega)$ 、光学伝導スペクトル。

次に、モット絶縁体における光吸収スペクトルの実験について述べる。Fig.1.5 に J.P.Falch [41] らによって測定された2次元モット絶縁体である  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  における光吸収スペクトルの実験結果を示す。この図より低エネルギー側にブロードなピークがあり、高エネルギー側に幅広い裾を引いた吸収スペクトルが観測されていることがわかる。他の物質での光吸収スペクトルに興味を持たれるが、2次元モット絶縁体の実験の例は少ない。

一方、1次元モット絶縁体では多くの実験が行われている。Fig.1.6にM.Ono [42]らによって測定された、1次元ハロゲン架橋ニッケル錯体と $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ の光吸収スペクトルを示す。1次元ハロゲン架橋ニッケル錯体の場合は比較的鋭いピークが低エネルギー側にあり、高エネルギー側に幅広い裾があり、 $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ はよりブロードな光吸収スペクトルが観測されている。前者は比較的 $V/t$ が大きい場合、後者は比較的 $V/t$ が小さい場合であると考えられる。実際の物質のパラメータは、1,2次元とも酸化銅では $t = 0.4[\text{eV}]$ ,  $t/U = 0.08$ ,  $V/t = 1.5$ 程度と推定されているが、同じ酸化銅でも $V/t$ はばらつきが大きい。1次元ハロゲン架橋ニッケル錯体では $t = 0.22[\text{eV}]$ ,  $t/U = 0.09$ ,  $V/t = 5$ 程度であると見積もられている [18]。

以上を踏まえ、本論文においては、主に2次元モット絶縁体における光吸収スペクトルについて研究し、これを通じて、光励起状態に対する電子相関効果について明らかにすることを試みる。光学応答という観点から、低次元モット絶縁体における特異な性質を明らかにすることが本研究の目的である。そこで、電荷束縛効果が取り入れられている拡張ハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニアンを用い、数値厳密対角法により光吸収スペクトルを計算し、光吸収スペクトルにおける電荷束縛効果の解析を行った。さらに2次元モット絶縁体に固有の特徴をより理解するために、光吸収スペクトルの主なピークに対応するエネルギー固有状態を求め、その電荷相関関数、スピン相関関数を分析し、エネルギー固有状態の物理的性質を明らかにした。さらに2次元系と比較するために1次元系モット絶縁体においても同様の解析を行った。

この論文は、以下のように構成されている。第2章においては、光吸収スペクトルを記述するモデル、解析手法を説明する。第3章においては、光吸収スペクトルを用いた解析結果を述べる。4章においては、光吸収スペクトルの解析結果の結論を述べる。

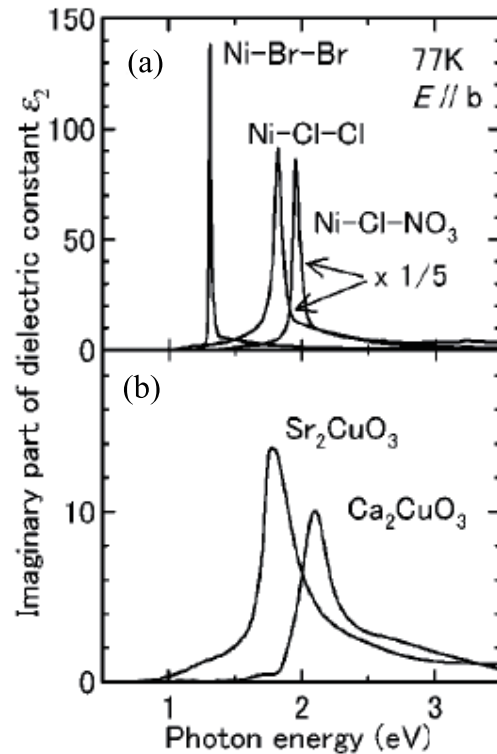


Fig. 1.6. (a) 1次元ハロゲン架橋ニッケル錯体における光吸収スペクトル。(b)  $\text{Sr}_2\text{CuO}_3$ における光吸収スペクトル。

## 第2章 モデル, 解析方法

### 2.1 拡張ハバードハミルトニアンと 電子光子相互作用ハミルトニアン

低次元強相関電子系における、光吸収スペクトルを解析するために、以下の古典電磁場と結合した低次元強相関電子系を記述するハミルトニアンを考える。

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_{e-p}. \quad (2.1.1)$$

ここで、電子系のハミルトニアン  $\hat{H}_e$  として、低次元強相関電子系の標準モデルとして広く認められているハバードモデルに、最近接サイト間クーロン相互作用を付加した拡張ハバードモデルを用いる。拡張ハバードハミルトニアンは以下の式で与えられる。

$$\hat{H}_e = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V}, \quad (2.1.2a)$$

$$\hat{T} = -t \sum_{n,m,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma}, \quad (2.1.2b)$$

$$\hat{U} = U \sum_n n_{n,\uparrow} n_{n,\downarrow}, \quad (2.1.2c)$$

$$\hat{V} = \frac{V}{2} \sum_{n,m} \left(1 - \sum_{\sigma} n_{n,\sigma}\right) \left(1 - \sum_{\sigma'} n_{m,\sigma'}\right), \quad (2.1.2d)$$

ここで用いた表記は以下の通りである。

$\hat{T}$	: 最近接サイトへのホッピング項
$\hat{U}$	: 同一サイト間クーロン相互作用項
$\hat{V}$	: 最近接クーロン相互作用項
$t$	: 最近接サイト間ホッピングエネルギー
$U$	: 同一サイト間クーロン相互作用エネルギー
$V$	: 最近接サイト間のクーロン相互作用エネルギー
$c_{m,\sigma}^\dagger$	: サイト $m$ におけるスピン $\sigma$ を持った電子の生成演算子
$c_{m,\sigma}$	: サイト $m$ におけるスピン $\sigma$ を持った電子の消滅演算子
$\sum^{\text{NN}}$	: 最近接サイト対の和を取ることを意味する
$n_{m,\sigma} = c_{m,\sigma}^\dagger c_{m,\sigma}$	

$V = 0$  とした場合、 $\hat{H}_e$  はハバードハミルトニアンとなる。



次に、電子光子相互作用ハミルトニアン  $\hat{H}_{e-p}$  [43] は、外場を古典的に扱い、以下のように与えられる。

$$\hat{H}_{e-p} = -\mathbf{A}(\tau) \cdot \hat{\mathbf{J}}, \quad (2.1.3a)$$

$$\hat{\mathbf{J}} = it \sum_{n,m} \sum_{\sigma} (\mathbf{Q}_m - \mathbf{Q}_n) c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma}. \quad (2.1.3b)$$

ここで用いた表記は以下の通りである。

- $\mathbf{A}(\tau)$  : 時刻  $\tau$  におけるベクトルポテンシャル  
(ここで、光の波長は、考察する系よりも十分大きいので、 $\mathbf{A}$  は空間的に変化しないとし、 $c = e = \hbar = 1$  とする原子単位系を採用した)
- $\mathbf{Q}_m$  : サイト  $m$  の位置ベクトル
- $\hat{\mathbf{J}}$  : 電流演算子

## 2.2 有効ハミルトニアン

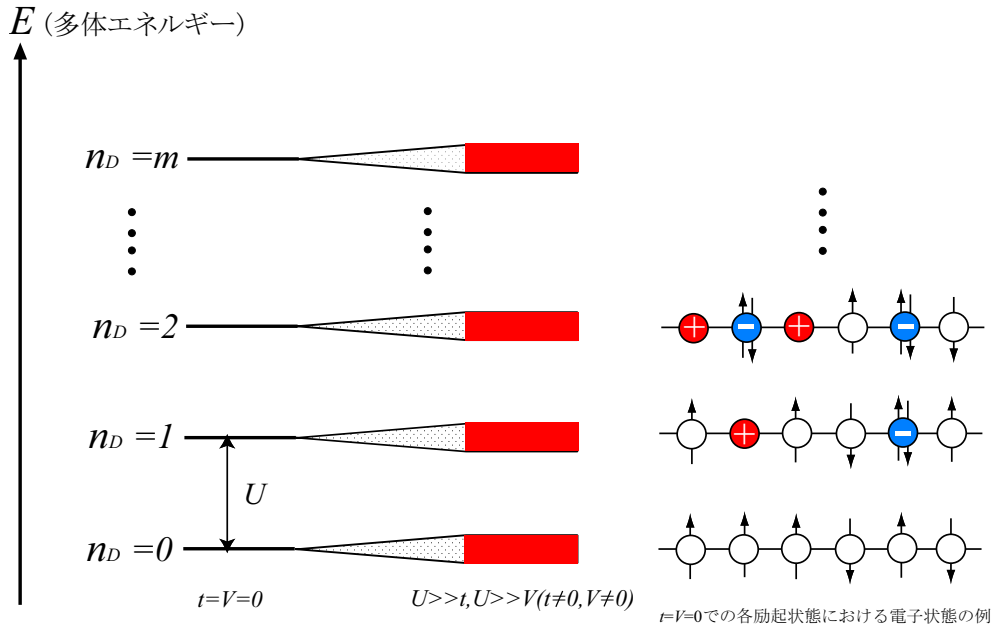


Fig. 2.1. 多体ハミルトニアンにおける励起バンド概念図

低次元強相関電子系を記述するハバードハミルトニアンのような多体ハミルトニアンを厳密に解くことは、計算時間及びコンピューターのメモリー容量の制限から、極めて小さいシステムサイズに限られるため、有限サイズ効果の問題が深刻となる。そこで、より大きなシステムサイズでの計算が可能となる拡張ハバードハミルトニアンの有効ハミルトニアン [44, 45] を用いる。拡張ハバードハミルトニアンの2次元16サイトにおけるヒルベルト空間の次元数は200万次元を越え、次に大きなサイズの18サイトのヒルベルト空間の次元数は4千万次元を越える。このことより、通常の計算機資源では16サイトが計算できる限界である。一方、拡張ハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニアンでは26サイト(ヒルベルト空間の次元数は1千万次元を越える)まで計算可能であり、有限サイズ効果を大幅に減少させることができると期待される。この有効ハミルトニアンの詳細は、文献 [45] に記載されている。よって、ここではその概要のみを述べる事にする。

有効ハミルトニアンを導出するために、 $U \gg t, U \gg V$  を仮定する。

$t=V=0$  の場合、拡張ハバードハミルトニアンは容易に解く事ができる。 $n_D$  を2重占有サイト数とすると、多体ハミルトニアンのエネルギー固有値  $E$  は、 $E = U n_D$  となり、多体系のエネルギー準位は2重占有サイト数のみで決まる。その結果、エネルギー準位はFig. 2.1の左側のような構造になる。エネルギー準位は離散的な値を取り、各準位は間隔  $U$  の等間隔で分布する。各エネルギー準位には、様々なスピン構造を持った膨大な数の状態が縮退している。Fig.2.1の右の概念図に示されているように、 $n_D = 0$  のエネルギー準位には、2重占有サイト数が0個の状態がすべて縮退しており、 $n_D = 1$  のエネルギー準位には、2重占有サイト数が1個の状態がすべて縮退している。

以下同様である。

$t \neq 0, V \neq 0, U \gg t$ , かつ  $U \gg V$  の場合、拡張ハバードハミルトニアン各エネルギー準位は、運動エネルギー項  $\hat{T}$  と最近接サイト間クーロン相互作用項  $\hat{V}$  によってその縮退が解かれて、各準位は Fig. 2.1 の中央の赤色で示されているようなエネルギーバンドになる。基底状態は  $n_D = 0$  の一番下のバンドにおける有効ハミルトニアンにおける最低エネルギー状態であるから、このハミルトニアンを数値厳密対角化することにより厳密に求めることができる。ただし、ここでのエネルギーバンドは、多粒子系全体のエネルギーバンドであって、独立電子近似に基づく1電子エネルギーバンドではない。強相関電子系を扱う場合、1電子エネルギーバンドの概念自身が正当化できない。

この条件の下で、 $\hat{T}$  の効果を  $t/U$  の2次まで考慮する事により、拡張ハバードハミルトニアンから、 $m$  光子励起状態を記述するための有効ハミルトニアンを導出する事ができ、以下のように表される。

$$\hat{H}_e = \sum_m \hat{H}_{\text{eff}}^{(m)}, \quad (2.2.1)$$

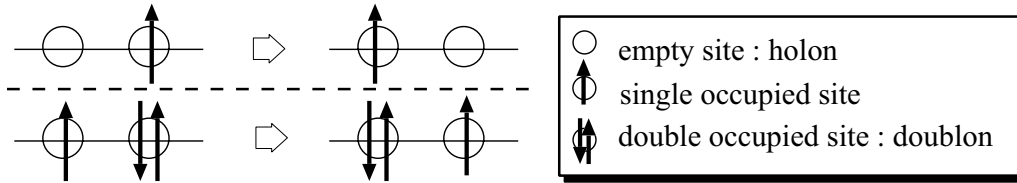
ここで、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(m)}$  は、下から  $m+1$  番目のバンド内の状態を記述する有効ハミルトニアンであり、以下のように与えられる。

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(m)} = mUP_m + P_m\hat{T}P_m + \hat{V}P_m - U^{-1}P_m\hat{T}P_{m+1}\hat{T}P_m + U^{-1}P_m\hat{T}P_{m-1}\hat{T}P_m, \quad (2.2.2)$$

ここで、 $P_m$  は2重占有サイトが  $m$  個の全ての状態で張られるヒルベルト部分空間  $S_m$  への射影演算子である。式 (2.2.2) における各項の特徴を以下に述べる。

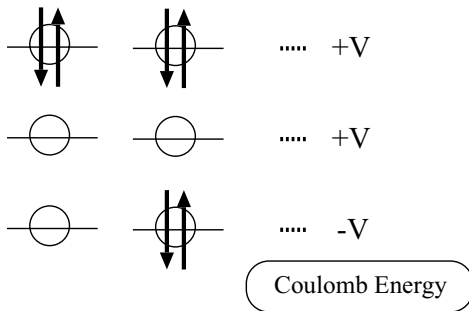
•  $P_m \hat{T} P_m :$

2重占有サイト、もしくは空サイトの最近接サイトへの移動



•  $\hat{V} P_m :$

最近接サイト間におけるクーロン相互作用



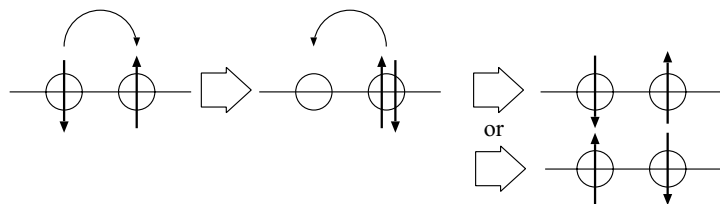
•  $U^{-1} P_m \hat{T} P_{m+1} \hat{T} P_m :$

(i) 最近接サイト間反強磁性ハイゼンベルグスピン間相互作用

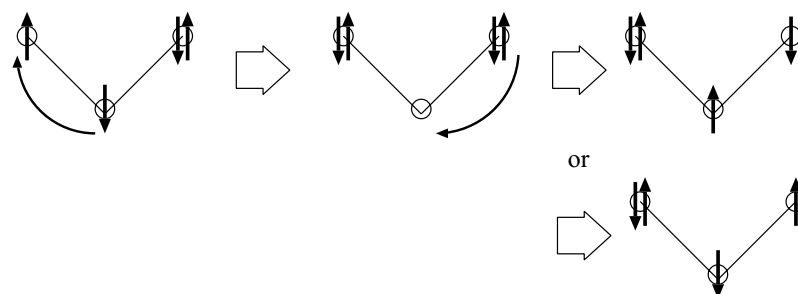
$$J \sum_{\langle l,m \rangle} \left( \hat{S}_l \cdot \hat{S}_m - \frac{1}{4} n_l n_m \right), \quad J = 4t^2/U$$

$\hat{S}_l$  はサイト  $l$  におけるスピン演算子

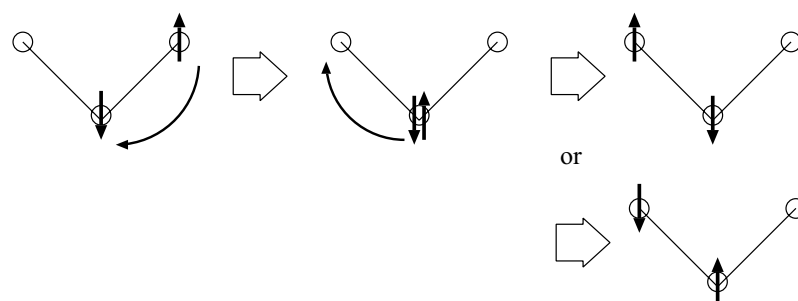
$\sum_{\langle l,m \rangle}$  は、最近接サイト対の和をとる事を意味する



(ii) 2重占有サイトの第2、もしくは第3近接1重占有サイトへの移動

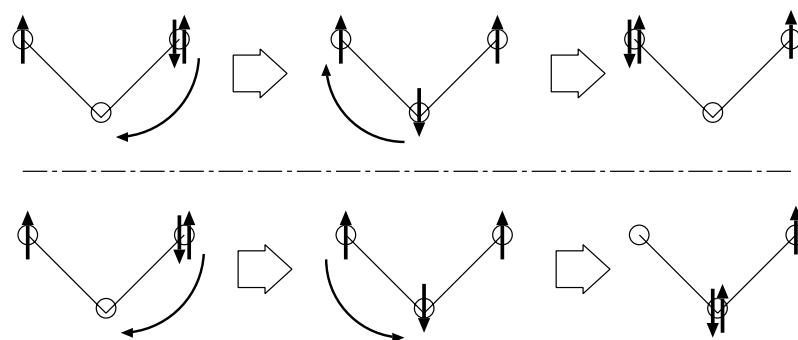


(iii) 空サイトの第2、もしくは第3近接1重占有サイトへの移動

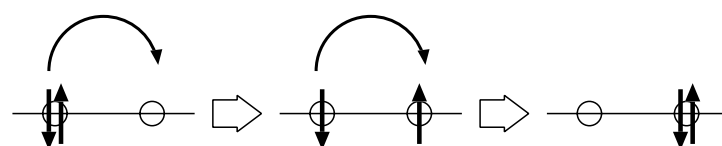


•  $U^{-1}P_m\hat{T}P_{m-1}\hat{T}P_m\cdots$  光励起状態の有効ハミルトニアンに固有な項 :

(i) 最近接2重占有サイトと空サイト対の移動



(ii) 最近接2重占有サイトと空サイト対の交換



これらの全ての項の中で、重要項として一般的に考えられているのは、 $P_m \hat{T} P_m$ 、 $\hat{V} P_m$  及び最近接サイト間反強磁性ハイゼンベルグスピン間相互作用である。 $P_m \hat{T} P_m$  のみが  $t$  に比例し、その他の項の中で、 $\hat{V} P_m$  のみが  $V$  に比例し、それ以外の全ての項は  $t^2/U$  に比例する。最近接サイト間反強磁性ハイゼンベルグスピン間相互作用項は、小さいパラメーター  $t^2/U$  に比例するが、1重占有サイトのペアに対して作用するため、システムサイズに比例する。その結果、最近接サイト間反強磁性ハイゼンベルグスピン間相互作用項も主要な働きをする項となる。これらの重要項のうち、 $P_m \hat{T} P_m$  と最近接サイト間反強磁性ハイゼンベルグスピン間相互作用項のみを取り入れたのが、以下のハミルトニアンで与えられる  $t$ - $J$  モデルである。

$$\hat{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} P_m (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \text{h.c.}) P_m + J \sum_{\langle i,j \rangle} P_m \left( \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_i n_j \right) P_m . \quad (2.2.3)$$

このことより  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(m)}$  は、 $\hat{H}_{t-J}$  を光励起状態へも適用できるように拡張したモデルであることがわかる。

## 2.3 解析方法

本論文で扱った系は付録 A で示されているように、2次元系においては、周期的境界条件を用いた2次元正方格子を考察し、用いたサイト数  $N$  は  $N = 18, 26$  である。1次元系においては周期的境界条件を用いた1次元鎖を考察し、サイト数は  $N = 18, 26$  を用いた。いずれもハーフフィリングの場合を考察する。いずれのサイト数においても、定性的には同じ結果が得られた。なお、計算時間が非常にかかるエネルギー固有状態の計算においては2次元1次元ともに、主に  $N = 18$  を用いて計算を行った。

### 2.3.1 光吸収スペクトル

基底状態  $|\psi_0\rangle$  からの光吸収スペクトル [46] は、

$$\alpha(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \langle \psi_0 | \hat{J} \frac{1}{\omega + E_0 + i\epsilon - \hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}} \hat{J} | \psi_0 \rangle \right] \quad (2.3.1)$$

$$= \sum_n |\langle \psi_n | \hat{J} | \psi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - (E_n - E_0)), \quad (2.3.2)$$

で与えられる。ここで、 $E_0$  は基底状態のエネルギー固有値、 $E_n$  は  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  のエネルギー固有値であり、 $|\psi_n\rangle$  はエネルギー固有状態。 $\epsilon$  は正の無限小の数である。また、 $\hat{J} = \hat{J} \cdot e$  であり、 $e$  は光の偏光方向を表わす単位ベクトルである。光の偏光方向としては、2次元系では正方格子の一辺に、1次元系では1次元鎖に平行な方向に、偏光している場合を考える。式 (2.3.1) を導出する際に、 $\hat{J} | \psi_0 \rangle \in S_1$  を用いている。式 (2.3.1) はランチョス法を用いた数値計算により得られる [16]。この方法の詳細については付録 B に示す。ただし数値計算においては、 $\epsilon$  を有限の正の数としなければならない。本論ではすべてのクーロンパラメーターにおいて  $\alpha(\omega)$  が収束する一番小さい  $\epsilon$  を用いて計算を行った。

### 2.3.2 自由誘導減衰 (FID)

超短レーザーパルスによって光励起された強相関電子系の位相緩和を評価するために、自由誘導減衰 (FID) 信号強度 [47] を計算する。超短レーザーパルスによる光励起状態は

$$|\psi(\tau)\rangle = \exp(-i\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}\tau) \hat{J} |\psi_0\rangle, \quad (2.3.3)$$

と書ける。ここで、 $\tau$  はパルス励起後の経過時間である。入射光と同じ方向のコヒーレント発光現象である。FID の信号光強度は

$$I_{\text{FID}}(\tau) = |\langle \psi_0 | \hat{J} | \psi(\tau) \rangle|^2, \quad (2.3.4)$$

で与えられる。光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$  は  $\sqrt{I_{\text{FID}}(\tau)}$  のフーリエ変換で得られる。これら2つ物理量は実際の数値計算において相補的な情報を与えることが多い。式 (2.3.1)

を解く際に  $\alpha(\omega)$  を収束させるために比較的大きな  $\epsilon$  を必要とする。結果として  $\epsilon$  の大きさの周波数領域において  $\alpha(\omega)$  が平均化され、微細構造が失われてしまう。一方で式 (2.3.4) を求める際には人工的な幅や、緩和因子を必要としない。それゆえ、 $\alpha(\omega)$  で消失した情報を  $I_{\text{FID}}(\tau)$  を評価することにより解析できる可能性がある。

### 2.3.3 ランチョス法

光吸収スペクトルの主要な構造に寄与するエネルギー固有状態を求めた。本論文で扱う有効ハミルトニアン次元数は2千万にも達する。このような巨大行列を対角化し、エネルギー固有関数を求めることは通常用いられるハウスホルダー法などでは不可能である。そこで拡張ランチョス法により、対角化を行った。ランチョス法においては、ハミルトニアン行列  $H_{\text{eff}}^{(1)}$  の Krylov 列  $\{\vec{x}_0, H_{\text{eff}}^{(1)}\vec{x}_0, (H_{\text{eff}}^{(1)})^2\vec{x}_0, \dots, (H_{\text{eff}}^{(1)})^K\vec{x}_0\}$  の線形結合をすることにより、エネルギー固有値が最も低いほうから数個のエネルギー固有状態を得ることができる。ここでは  $\vec{x}_0$  は初期ベクトルであり、これはランダムに作られる、 $K$  は解が収束するのに十分な整数である。ただし Krylov 列を収納するためには膨大なメモリが必要となるために、以下のような手順で収束解を得る拡張ランチョス法を用いた。

拡張ランチョス法とは

- (1) 小さな  $K$  での Krylov 列を作る。
- (2) Krylov 列の線形結合  $\vec{y}$  で基底状態を近似する。
- (3)  $\vec{y}$  を  $\vec{x}_0$  として使い、(1),(2) を収束するまで繰り返す。

最低エネルギー固有状態を求める際は  $H_{\text{eff}}^{(1)}$  を用いて Krylov 列を作るが、 $H_{\text{eff}}^{(1)}$  の代わりに  $(H_{\text{eff}}^{(1)} - E)^2$  を用いることによりエネルギー固有値が  $E$  に最も近い  $H_{\text{eff}}^{(1)}$  におけるエネルギー固有値を得ることができる。なぜならば、 $H_{\text{eff}}^{(1)}$  の固有値  $\nu_i$  の固有ベクトルは  $(H_{\text{eff}}^{(1)} - E)^2$  の固有ベクトルでもあり、固有値は  $(\nu_i - E)^2$  であることから、固有値が  $E$  に最も近い  $H_{\text{eff}}^{(1)}$  の固有状態が、演算子  $(\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)} - E)^2$  の最小の固有値  $(\nu_i - E)^2$  を持つ固有ベクトルとなるからである。ただし、このようなやり方で、励起状態を求める場合、収束を得るのが厳しく、数値的計算としては、基底状態を求める計算と比較すると巨大な計算量が必要となる。



### 2.3.4 相関関数

エネルギー固有状態の物理的な特性を解析するために、以下で定義される相関関数を用いる。

電荷相関関数  $\zeta$  は、

$$\zeta(r) = \langle \psi_p | d_n d_m | \psi_p \rangle, \quad (2.3.5)$$

と定義される。ここで  $r$  はサイト  $n, m$  間の距離であり、 $d_m = 1 - \sum_{\sigma} c_{m,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma}$  はサイト  $m$  の電荷演算子、 $|\psi_p\rangle$  はエネルギー固有状態である。Fig.2.2 に示すように、光吸収スペクトルに寄与する  $S_1$  に属する状態は、正負の電荷がそれぞれ1個ずつなので、 $\zeta(r)$  は距離  $r$  離れて正負の電荷が存在する確率に比例している。

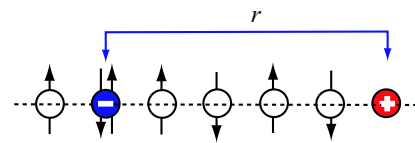


Fig. 2.2. 電荷相関関数の模式図。

スピン相関関数  $\eta$  は、

$$\eta(r) = \langle \psi_p | \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m | \psi_p \rangle, \quad (2.3.6)$$

と定義される。ここで  $S_m$  はサイト  $m$  のスピン演算子である。 Fig.2.3 に示すよう

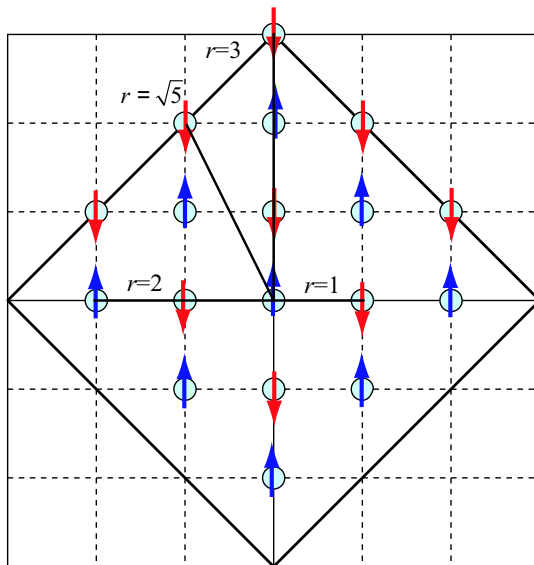


Fig. 2.3. 2次元18サイトにおけるネール状態の模式図。

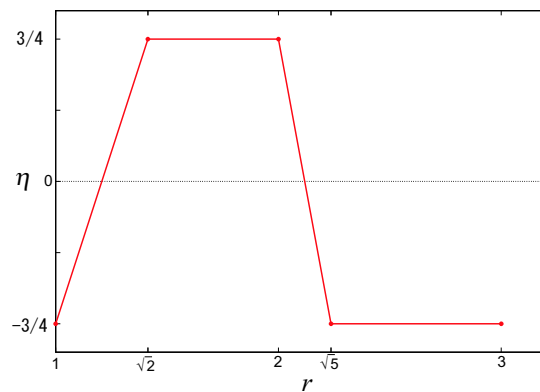


Fig. 2.4. 2次元18サイトでのネール状態におけるスピン相関関数  $\eta$ 。

に、2次元18サイトにおけるネール状態のスピン相関関数を評価すると Fig.2.4 のよ

うになる。

射影スピン相関関数  $\tilde{\eta}$  [48] は以下のように定義される。

$$\tilde{\eta}(r) = \langle \psi_p | \sum_{l=0}^2 \tilde{P}_l \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_{r+l} \tilde{P}_l | \psi_p \rangle, \quad (2.3.7)$$

ここで、 $\tilde{P}_l$  はサイト  $0, r+l$  の間に  $l$  個の 2 重占有サイト、もしくは空サイトがある状態からなるヒルベルト部分空間への射影演算子である。この相関関数は、相関を取るサイトの間には電荷が存在する場合に、Fig.2.5 のように、その電荷を除外して距離を定義した場合のスピン相関関数である。もし、スピン・電荷分離が成立している場合、 $\tilde{\eta}$  は分離されたスピン波動関数におけるスピン相関関数となる。ただし射影スピン相関関数は 1 次元系のみで定義される。計算では 2 次元系では  $\eta(r)$ , 1 次元系では  $\tilde{\eta}(r)$  を用いた。

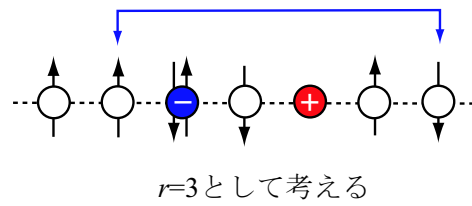


Fig. 2.5. 射影相関関数における相関距離  $r = 3$  の取り方の模式図。

### 2.3.5 有効ハミルトニアン の妥当性

結果を述べる前に、拡張ハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニアン  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(m)}$  の妥当性について、ここで議論する。Fig.2.6~2.8に、2次元系16サイトにおける様々な  $t/U, V/t$  での、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  および拡張ハバードハミルトニアン (EH) を用いて計算された  $\alpha(\omega)$  を示す。 Fig.2.6~2.8より、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  は  $t/U \lesssim 0.04$  で、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  は  $V/t \leq 10, V \leq U/4$  において

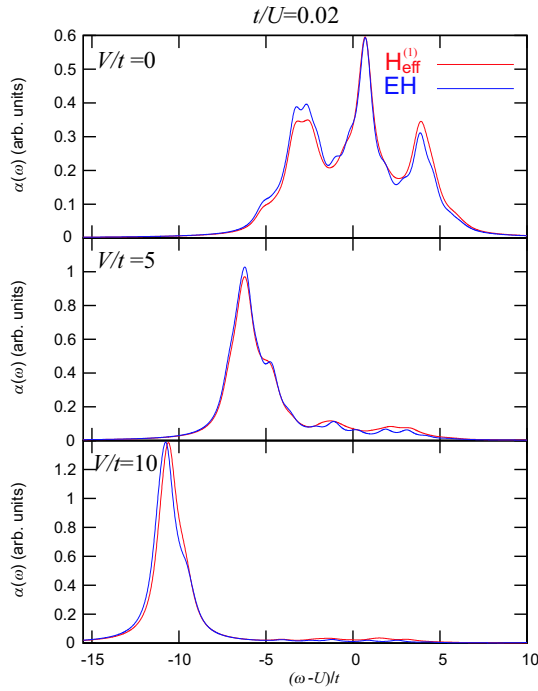


Fig. 2.6. 2次元16サイト,  $t/U = 0.02$  における様々な  $V/t$  における  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  と拡張ハバードハミルトニアン (EH) での  $\alpha(\omega)$  の比較。  $\epsilon = 0.5$  を用いた。  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  による  $\alpha(\omega)$  は赤線で、拡張ハバードモデルハミルトニアンによる  $\alpha(\omega)$  は青線で示す。

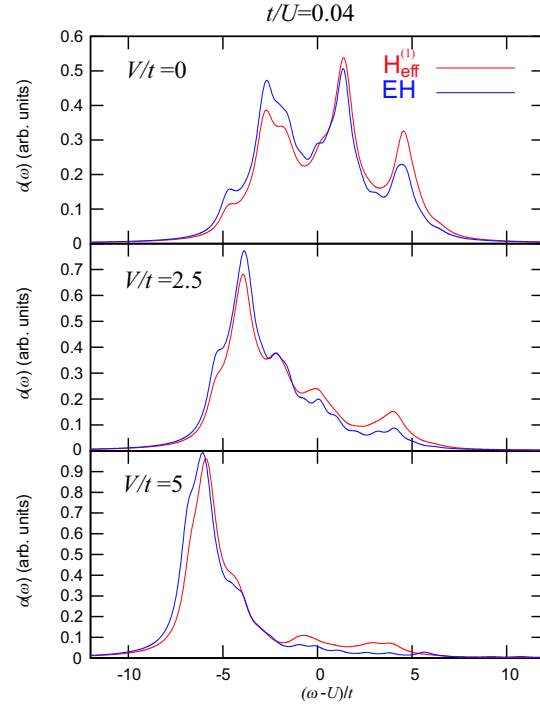


Fig. 2.7. 2次元16サイト,  $t/U = 0.04$  における様々な  $V/t$  における  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  と拡張ハバードハミルトニアン (EH) での  $\alpha(\omega)$  の比較。  $\epsilon = 0.5$  を用いた。  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  による  $\alpha(\omega)$  は赤線で、拡張ハバードモデルハミルトニアンによる  $\alpha(\omega)$  は青線で示す。

拡張ハバードハミルトニアンの結果をよく再現することが確認できた。2次元モット絶縁体は  $V/t$  を増加してゆくと、 $V = U/4$  付近で基底状態が電荷密度波 (CDW) 状態 [49] になる。  $V \leq U/4$  は CDW 状態への転移が起きないための条件である。  $t/U = 0.1$  付近に至ると  $\alpha(\omega)$  の差は顕著になる。しかしながら  $t/U = 0.1, V \leq U/4, V/t \leq 10$  において定性的に同じ  $\alpha(\omega)$  が得られることがわかる。それゆえ、  $t/U = 0.1, V/t \lesssim 10, V \leq U/4$  のパラメータ領域においては、  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(m)}$  は拡張ハバードハミルトニアンの有効ハミルトニアンとして妥当であることが結論づけられる。

本論文において以降、エネルギーの単位として  $t$  を用い、時間の単位として  $1/t$  を用いる。 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(m)}$  においては3つのエネルギースケールがある。電荷移動項  $P_m \hat{T} P_m$  は  $O(1)$  であり、最近接クーロン相互作用項  $\hat{V} P_m$  は  $O(V)$  であり、そして他のすべての項は  $O(U^{-1})$  である。

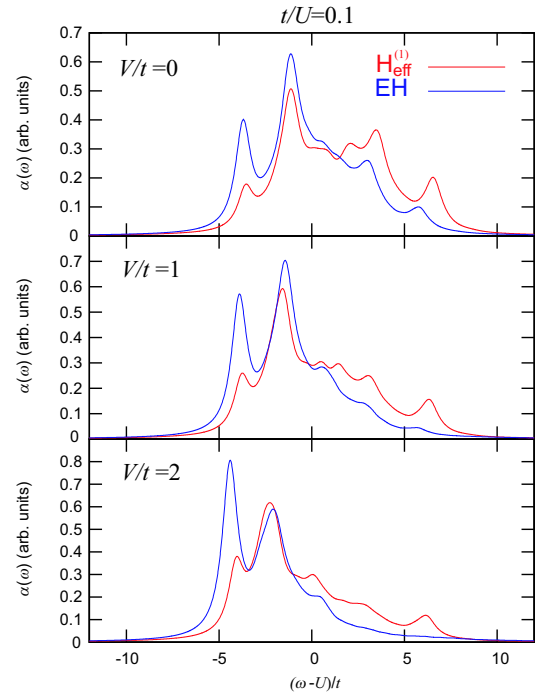


Fig. 2.8. 2次元 16 サイト,  $t/U = 0.1$  における様々な  $V/t$  における  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  と拡張ハバードハミルトニアン (EH) での  $\alpha(\omega)$  の比較。  $\epsilon = 0.5$  を用いた。 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  による  $\alpha(\omega)$  は赤線で、拡張ハバードモデルハミルトニアンによる  $\alpha(\omega)$  は青線で示す。

## 第3章 光吸収スペクトルの解析

### 3.1 ハバードモデルにおける有効ハミルトニアンを用いた解析

この節では最初にオンサイトクーロン相互作用のみ作用している ( $V = 0$ ) ハバードモデルの場合における有効ハミルトニアンを用いた計算結果を議論する。様々な  $U^{-1}$  における光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$  を Fig.3.1 に示す。以下に示すように、 $U^{-1} \lesssim 0.01$  の強相関領域と  $U^{-1} \gtrsim 0.01$  のより相関の弱い領域では  $\alpha(\omega)$  が異なる。最初に  $U^{-1} \lesssim 0.01$  の強相関領域から議論する。

#### 3.1.1 強相関領域

Fig.3.1 より強相関領域の光吸収スペクトルには以下の特徴が見られることがわかる。

- $-8 \lesssim \omega - U \lesssim 8$  領域において幅広く分布したスペクトル
- $\omega - U = 0$  付近に鋭いピーク (central ピーク),  $\omega - U = \pm 2.7$  付近に2つの幅広いピーク (broad ピーク) が見られる。
- $U^{-1}$  が増加するにつれ、central ピーク がブルーシフトし、ピークの幅が増加する。
- central ピーク構造を除いて、 $\alpha(\omega)$  はほとんど  $U$  に依存しない。

ここで、2次元系の光吸収スペクトルの特徴をより明確にするために、五味らによる同一の有効ハミルトニアンを用い同じサイト数を用いて求められたコヒーレント過渡的光学応答の計算結果を Fig.3.2 に示す。一般的な銅酸化物のホッピングエネルギー  $t \sim 0.4$  [eV] を用いると、 $\tau = 1$  は 1.6 [fs] に対応する。なおこの解析結果は文献 [47, 50] で既に発表されている。文献 [47, 50] より明らかになったように、過渡的光学応答には、 $\tau \lesssim 1$  のより速い緩和と  $\tau \gtrsim 4$  で見られるより遅い緩和の2段階の緩和が見られること、 $1 \lesssim \tau \lesssim 4$  においては量子ビートが現れることが、Fig.3.2 より確認できる。より速い緩和は電荷の AF スピンバックグラウンドへの拡散に由来する。より遅い緩和は、電荷が拡散することにより発生した新しい電荷配置に対するスピンの再配置に由来する。すなわち、遅いスピン緩和は電荷とスピン自由度の結合を通じて生じるのである。このことより、コヒーレント過渡的光学応答を解析することによって、電荷とスピン自由度の相互作用を明らかにすることができる。

ここで、遷移モーメントが  $\Delta E$  のエネルギー幅に分布している場合、 $\alpha(\omega)$  をフーリエ変換した  $\alpha(\tau)$  は大体  $2\pi/\Delta E$  程度の時間で緩和する。 $I_{\text{FID}} \propto |\alpha(\tau)|^2$  なので  $I_{\text{FID}}$

の緩和時間 ( $\ln I_{\text{FID}}$  の  $\tau$  に対する傾きの逆数) は  $\pi/\Delta E$  程度になる。Fig.3.2 より、電荷の緩和時間と量子ビートの周期はほとんど  $U$  に依存していないことがわかる。電荷の緩和時間を正確に決めるのは、減衰が指数関数的ではないので、難しいのであるが  $0 < \tau < 0.7$  の範囲の傾きを用いれば緩和時間は 0.1 となり、 $0.5 < \tau < 0.7$  の範囲の傾きを用いれば緩和時間は 0.06 となる。 $\alpha(\omega)$  は高、低エネルギーサイドともにゆっくりと減衰するため、バンド幅を決めるのは難しいが Fig.3.1 からわかるように、 $|\omega - U| \leq 7$  に、ほとんどの遷移モーメントが集中している。このバンド幅 ( $W \approx 14$ ) から見積もった緩和時間 ( $\pi/W \approx 0.2$ ) は電荷緩和時間と大体等しい。量子ビートの周期は約 1.5 で、2つの broad ピークのエネルギー差 (約 5.5) から見積もった周期 ( $\pi/5.5 \approx 1.1$ ) と大体等しい。以上の結果より、コヒーレント過渡的光学応答における、超高速な電荷の緩和と量子ビートは、 $\alpha(\omega)$  における、幅広いバンド幅、2つの broad ピークに対応していることがわかる。central ピークの幅に関しては、ピークはローレンツ型であると仮定し、半値幅をピーク幅として定義する。ただし、ピークは一定のスペクトル強度の上に乗っていると考え、 $\alpha = 0.4$  を基準としてピークの高さなどを考えた。Fig.3.1 からわかるように、central ピークの幅は  $U^{-1} \lesssim 0.005$  領域において、収束因子として人工的に導入された  $\epsilon$  の値に非常に近い。このことはピークの幅が  $\epsilon$  と同程度かそれよりも小さいことのみを示しており、この結果からは、真のピーク幅を決めることはできない。しかし、この結果は少なくともこの  $U^{-1}$  領域におけるスピン緩和時間との関係において矛盾がない。 $U^{-1} = 0.01$  において central ピークの幅は推定可能となり、0.29 と推定される。この幅は、スピン緩和時間 (約 7) から見積もられる幅 0.4 と大体一致している。さらに  $\alpha(\omega)$  において他のシャープなピーク構造が見られないことより、スピン緩和は central ピークと対応づけることができる。

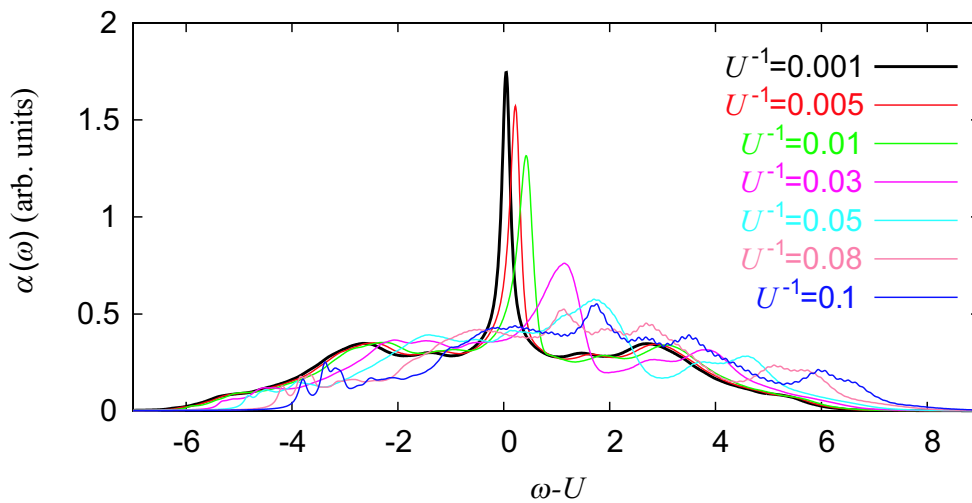


Fig. 3.1. 2次元系 26 サイト,  $V = 0$  における様々な  $U^{-1}$  における  $\alpha(\omega)$ 。  $\epsilon = 0.1$  を用いた。

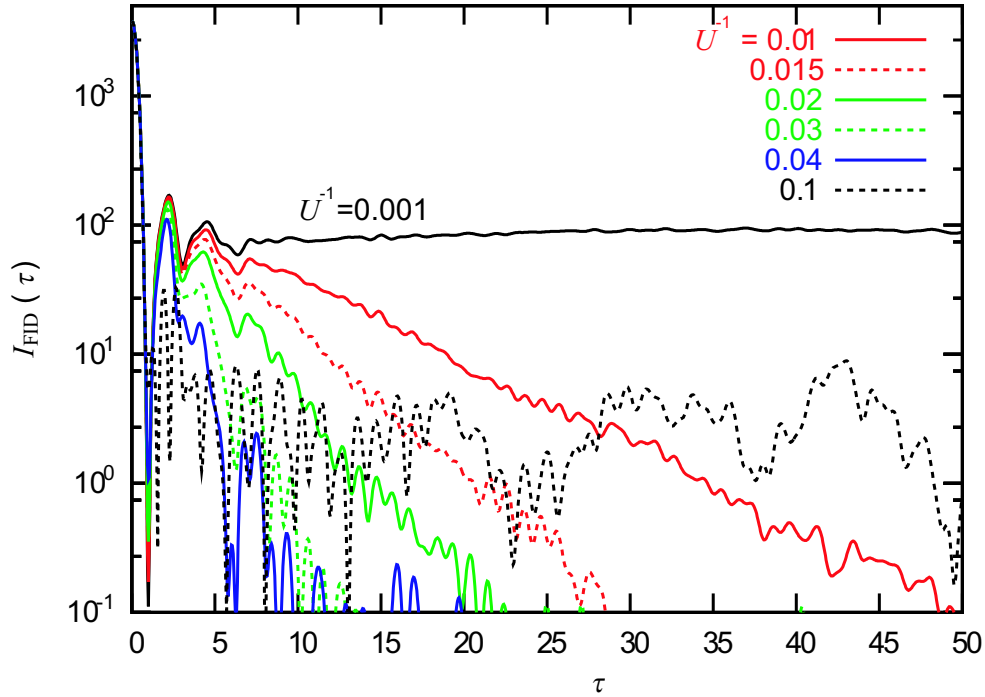


Fig. 3.2. 2次元系 26 サイト,  $V = 0$  における様々な  $U^{-1}$  における FID 強度  $I_{\text{FID}}(\tau)$  の時間依存性。

次に  $\alpha(\omega)$  における特徴的な構造を理解するために、これらの構造に対応する様々なエネルギー固有状態を求めた。Fig.3.3 に 2次元 26 サイト  $U^{-1} = 0.001$  における特徴的な構造に対応するエネルギー固有状態の電荷相関関数  $\zeta(r)$ 、スピン相関関数  $\eta(r)$  を、Fig.3.4~3.8 に 2次元 18 サイトにおける同じ物理量を示す。Fig.3.4 には central ピーク内の、Fig.3.5 には低エネルギー側の broad ピーク内の、Fig.3.6 には高エネルギー側の broad ピーク内の、Fig.3.7 には低エネルギー側のテール内 ( $E_p - U = -5$  付近) の、Fig.3.8 には高エネルギー側のテール内 ( $E_p - U = 5$  付近) の固有状態での  $\zeta(r), \eta(r)$  を示した。 Fig.3.5~3.8 より、central ピーク領域内のエネルギー固有状態を除けば、 $\alpha(\omega)$  の幅広いバンドの全ての領域において  $\zeta(r), \eta(r)$  はほぼ一定であることがわかる。

文献 [47] における過渡的の四光波混合や FID の解析により、スピン緩和は基本的に指数関数的な減衰を示すことが示されている。指数関数的緩和は無限の自由度をもつ場合の不可逆相緩和に特徴的な時間依存性である。無限個の自由度によって引き起こされる特徴的な緩和を示していることから、この central ピーク はほぼ無限個のエネルギー固有値への励起から生じるものであると結論づけることができる。実際に我々の数値計算においても central ピーク領域内で沢山のエネルギー固有状態が得られた。Fig.3.3 および Fig.3.4 からわかるように、central ピーク領域の電子状態は 2 つのパターンに分類することができる。1 つは  $\zeta(r), \eta(r)$  とおほとんど一定であるもので Fig.3.4 の  $U^{-1} = 0, E_p - U = 0.09$  のグラフがこれに相当する。もう一方は、 $\zeta(r)$  は同じ副格子 (Fig.3.9 に示す) に属しているペア同士での値はほとんど 0 になっており、 $\eta(r)$  はほぼ一定であることがわかる。

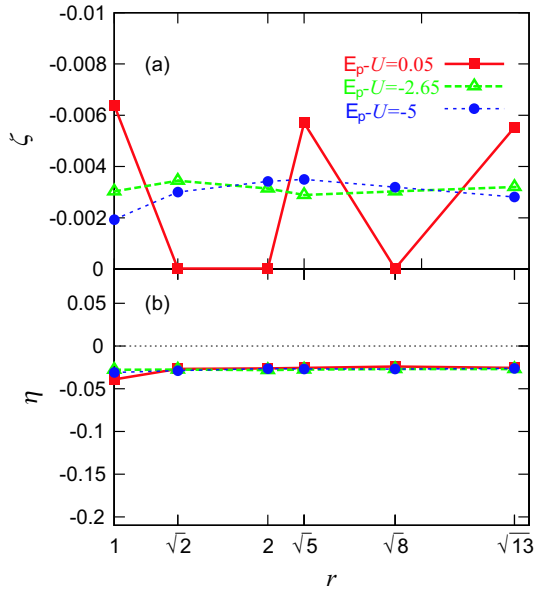


Fig. 3.3. 2次元26サイト  $U^{-1} = 0.001$  におけるエネルギー固有値  $E_p - U = 0.05$ (central ピーク),  $-2.65$ (低エネルギー側 broad ピーク内),  $-5$  のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

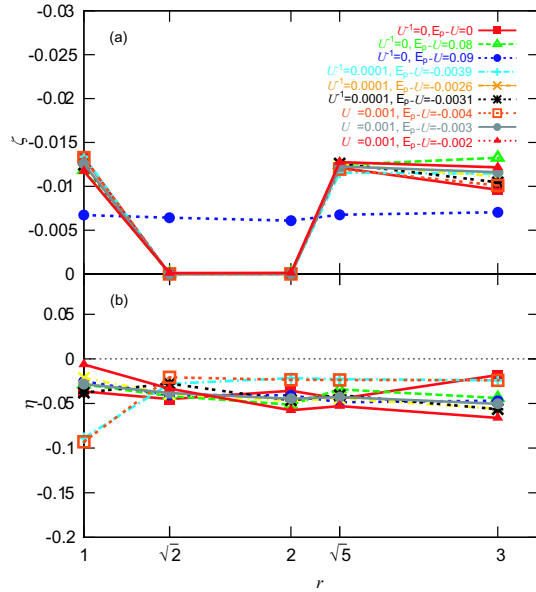


Fig. 3.4. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0, 0.00001, 0.0001, 0.001$  における central ピーク内のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

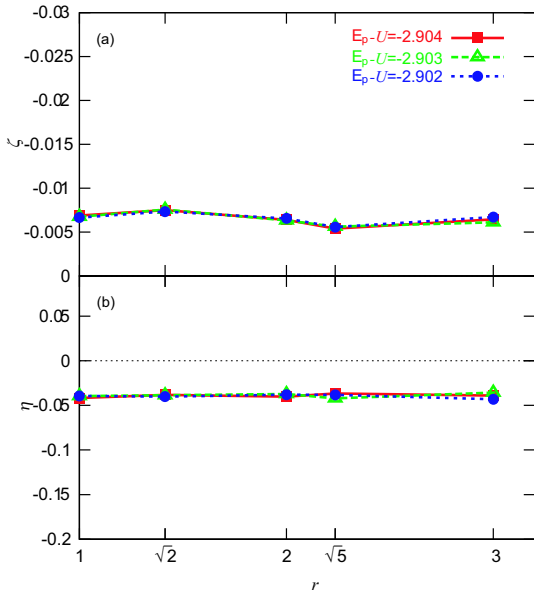


Fig. 3.5. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.001$  における低エネルギー側 broad ピーク内のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

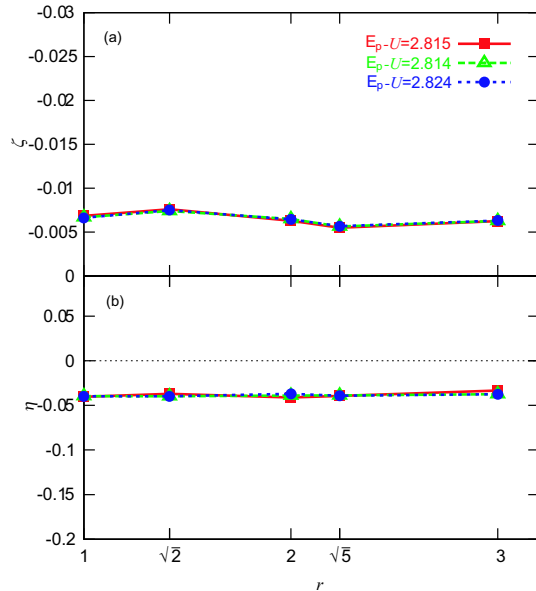


Fig. 3.6. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.001$  における高エネルギー側 broad ピーク内のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。



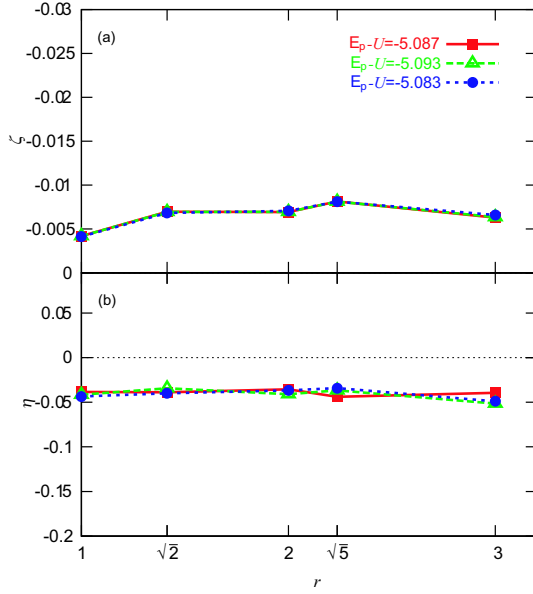


Fig. 3.7. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.001$  における  $E_p - U = -5$  付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

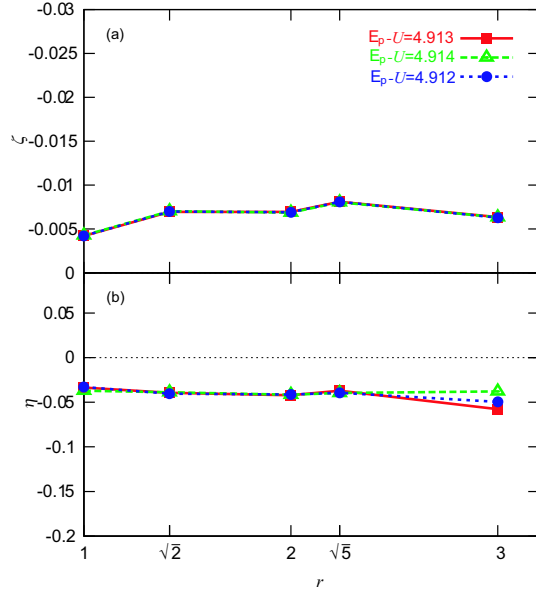


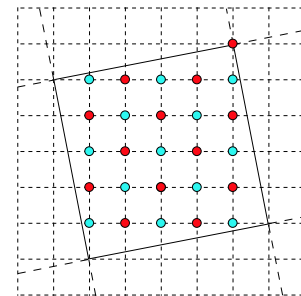
Fig. 3.8. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.001$  における  $E_p - U = 5$  付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

この強相関領域での結果は以下の議論により理解することができる。 $U^{-1} \lesssim 0.01$  においては、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  において電荷移動項  $P_1 \hat{T} P_1$  が支配的になる。なぜならば、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  においてこの項だけが  $O(1)$  であり、その他の項は  $O(U^{-1})$  であるからである。従って、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  のエネルギー固有値は、 $P_1 \hat{T} P_1$  のそれによってよく近似することができる。そこで、電荷移動項  $P_1 \hat{T} P_1$  におけるエネルギー固有値を考える。この項は

$$P_1 \hat{T} P_1 = - \sum_d (\tilde{T}_d + \tilde{T}_{-d}), \quad (3.1.1)$$

$$\tilde{T}_d = \sum_{n,\sigma} P_1 c_{n(d),\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} P_1, \quad (3.1.2)$$

と書くことができる。ここで  $n(\pm d)$  はサイト  $n$  の  $\pm d$  方向 ( $d = x, y$ ) の最近接サイトである。Fig.3.10 および 3.11 に表したように、演算子  $\tilde{T}_d$  はサイト  $n$  にあるホロン (ダブロン) をサイト  $n(-d)$  ( $n(d)$ ) に移動させる働きをし、さらに電荷の移動と同時に、 $n(-d)$  ( $n(d)$ ) のスピンも  $n$  へ移動させる。それゆえ、この  $\tilde{T}_d$  は単純な電荷移動だけを担う項ではなく、 $\tilde{T}_d$  が作用することにより電荷の位置が変化し、さらにバックグラウンドのスピンが一つ変化する。なお、 $P_1$  が存在するために、電荷を持たないサイト対に対しては、 $\tilde{T}_d$  は何も作用しない。



● : sublattice A  
● : sublattice B  
Fig. 3.9. 2次元26サイトにおける副格子

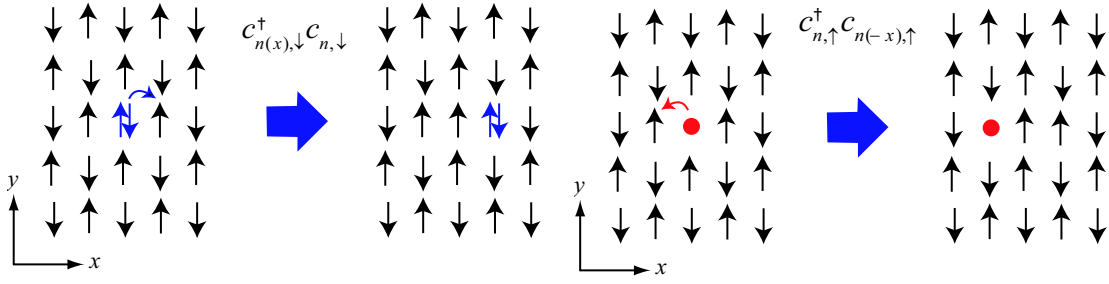


Fig. 3.10.  $\tilde{T}_x$  により、サイト  $n$  にあるダブル  
ロンを  $x$  方向の最近接サイトに移動させる効果の  
模式図

Fig. 3.11.  $\tilde{T}_x$  により、サイト  $n$  にあるホロン  
を  $-x$  方向の最近接サイトに移動させる効果の  
模式図

最初に簡単な場合として、ダブルロンもしくはホロンが1個ある場合における  $\tilde{T}_d$  の固有ベクトルを考える。ここで  $\tilde{T}_d$  がユニタリーであることから、固有値方程式は

$$\tilde{T}_d |\Psi(\mathbf{q})\rangle = \exp(iq_d) |\Psi(\mathbf{q})\rangle, \quad (3.1.3)$$

と書くことができる。ここで  $q_d$  は  $\mathbf{q}$  における  $d$  方向成分である。式 (3.1.1) から、 $|\Psi(\mathbf{q})\rangle$  は  $P_1 \hat{T} P_1$  の固有状態になっており、固有値を  $E^{(\text{CTT})}(\mathbf{q})$  とすると

$$E^{(\text{CTT})}(\mathbf{q}) = -2 \sum_d \cos q_d, \quad (3.1.4)$$

となることがわかる。

前述したように、 $\tilde{T}_d$  が作用することにより、電荷の移動に伴ってたった一つのスピ  
ンが変更されるのだから、 $\tilde{T}_d$  によって誘起されたスピン散乱は高次の  $O(1/N)$  のプロ  
セスとなる。結果として  $\mathbf{q}$  は

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}_i + \Delta \mathbf{q}_i(s), \quad (3.1.5)$$

と書ける。ここで、 $\mathbf{q}_i$  は周期的境界条件から決まる離散化した運動量である。26 サイト  
の2次元正方格子においては、 $\mathbf{q}_i = (\frac{2\pi}{26}(5n_i + m_j), \frac{2\pi}{26}(-n_i + 5m_j))$  となる。ここで  $n_i, m_i$   
は整数である。偏差  $\Delta \mathbf{q}_i(s)$  は  $O(1/N)$  であり [51]、添え字  $s$  はスピン構造を指定する  
ものである。高次  $O(1/N)$  の寄与であるスピン散乱を無視すると、 $\tilde{T}_d$  は方向  $-d(d)$  方  
向におけるホロン (ダブルロン) に対して格子並進演算子であり、 $-\mathbf{q}(\mathbf{q})$  はホロン (ダブル  
ロン) の運動量であるとみなすことができる。それゆえ、 $\mathbf{q}^{\text{spin}} = \mathbf{k} + \mathbf{q}$  ( $\mathbf{q}^{\text{spin}} = \mathbf{k} - \mathbf{q}$ ) を  
スピン系における運動量としてみなすことができる。ここで  $\mathbf{k}$  は系の全運動量を表す。

式 (3.1.3) より、スピン電荷配置  $|\phi\rangle$  と  $(\prod_{l=1}^L \tilde{T}_{d(l)}) |\phi\rangle$  は  $|\Psi(\mathbf{q})\rangle$  において同じウェイト  
で重ね合わせられていることがわかる。 $\prod_{l=1}^L \tilde{T}_{d(l)}$  はホロンもしくはダブルロンの  $L$  ス  
テップの移動をもたらす。Fig.1.4 で説明したように、ホロンもしくはダブルロンが移動  
するたびに AF スピン秩序が乱される。その結果、 $L$  が十分大きい場合は、 $(\prod_{l=1}^L \tilde{T}_{d(l)})$   
が作用することにより AF スピン秩序は破壊される。以上より、 $|\Psi(\mathbf{q})\rangle$  は AF スピン  
秩序を持たないことになる。

次にダブロンとホロンが1個ずつ存在している光励起状態を考える。ダブロンとホロンの衝突の効果は  $O(1/N)$  の寄与なので、これも無視すると、光励起状態の固有値は以下の式で与えられる。

$$E^{(\text{CTT})}(\mathbf{q}^{(\text{H})}, \mathbf{q}^{(\text{D})}) \cong -2 \sum_d \{ \cos q_d^{(\text{H})} + \cos q_d^{(\text{D})} \}, \quad (3.1.6)$$

ここで  $-q^{(\text{H})}, q^{(\text{D})}$  はホロンとダブロンの準運動量である。式 (3.1.6) よりバンド幅は16となることがわかり、この値は数値計算において得られた  $\alpha(\omega)$  での値と一致している。なお、 $\hat{H}_{\text{eff}}^{(1)}$  と  $P_1 \hat{T} P_1$  は、エネルギーの基準が  $U$  だけずれている。全運動量は  $k$  は

$$\mathbf{k} = -\mathbf{q}^{(\text{H})} + \mathbf{q}^{(\text{D})} + \mathbf{q}^{(\text{spin})}, \quad (3.1.7)$$

と書くことができる。式 (3.1.5) より準運動量は  $\mathbf{q}^{(\text{H})} = \mathbf{q}_i + O(1/N)$ ,  $\mathbf{q}^{(\text{D})} = \mathbf{q}_j + O(1/N)$  を満足する。このことから、膨大な数のエネルギー固有状態が、 $E^{(\text{CTT})}(q_i, q_j)$  の値にほぼ縮退しており、偏差は  $O(1/N)$  であることがわかる。これらのほとんど縮退したエネルギー固有状態は、ほとんど同じダブロンとホロンの準運動量を持っており、スピン構造が異なっている。この結果は完全なスピン・電荷分離を示唆しているものではない。例えば、先に示した通り、電荷移動運動は AF スピン秩序を破壊し、その結果、全てのエネルギー固有状態は AF スピン秩序を持っていない。 $q_i$  の自由度は  $N$  であることから、特定のエネルギー  $E^{(\text{CTT})}(q_i, q_j)$  にほとんど縮退した固有状態の数はヒルベルト空間の次元数を電荷自由度  $N^2$  で割った程度であることがわかる。たとえば、 $N = 26$  の場合、ヒルベルト空間の数は  $2 \times 10^7$  にも達し、縮退している状態数は約3万程度になる。この膨大な数の異なったスピン構造を持つエネルギー固有状態がほぼ同じホロンとダブロンの準運動量を持っており、その結果膨大な数のエネルギー固有状態が縮退しているという描像は  $\zeta(r), \eta(r)$  が central ピークの領域以外で、ほとんど一定であるという我々の得た結果に一致する。

さらに central ピークの特徴的な構造は、以下のようにこの描像に基づいて説明することができる。 $|q_x^{(\text{H})}| = |q_y^{(\text{H})}| = |q_x^{(\text{D})}| = |q_y^{(\text{D})}| \simeq \pi/2$  の運動量を持つエネルギー固有状態を考える。このとき  $E^{(\text{CTT})}(q_i, q_j) = 0$  でありこれらのエネルギー固有状態は central ピーク領域内に存在する。この場合、ホロン(ダブロン)が一つの副格子にしか存在しないエネルギー固有状態を、縮退したエネルギー固有状態の線形結合で作ることができる。例えば、電荷スピン配置  $|\phi\rangle$  が係数  $C$  を持って  $|\psi(q^{(\text{H})}, q^{(\text{D})})\rangle$  に含まれているとする。対称性の議論より  $|\psi(-q^{(\text{H})}, -q^{(\text{D})})\rangle$  にも  $|\phi\rangle$  が係数  $C$  を持って含まれていることがわかる。ここで  $C$  の位相は不定となるが、これが同じとなるように  $|\psi(-q^{(\text{H})}, -q^{(\text{H})})\rangle$  の位相を適当に選んでいるとする。このとき、 $\tilde{T}_d |\psi\rangle$  は  $(q^{(\text{H})} = q^{(\text{D})} = (\pi/2, \pi/2)$  の場合)、 $-iC$  の係数で  $|\psi(q^{(\text{H})}, q^{(\text{D})})\rangle$  に含まれ、 $iC$  で  $|\psi(-q^{(\text{H})}, -q^{(\text{D})})\rangle$  に含まれる。したがって、 $|\psi_+\rangle = |\psi(q^{(\text{H})}, q^{(\text{D})})\rangle + |\psi(-q^{(\text{H})}, -q^{(\text{D})})\rangle$  には  $\tilde{T}_d |\phi\rangle$  は含まれないことになる。この議論から  $|\psi_+\rangle$  においては、あるサイトにホロン(ダブロン)が存在する電荷配置が含まれる場合、その隣に存在する電荷配置は含まれないことになる。このよう

な波動関数を考察するとき、ダブロンとホロンが同じサイトには同時には存在できないという条件が重要な役割を果たす。この条件より、もしホロンが一つの副格子に属するサイトに存在すれば、ダブロンはもう一つの副格子に存在することになるはずである。結果として運動量  $|q_x^{(H)}| = |q_y^{(D)}| = |q_x^{(H)}| = |q_y^{(D)}| \simeq \pi/2$  をもつ状態の  $\zeta(r)$  は、同じ副格子に属するサイトペアにおいて、0になる。このことは central ピークに寄与しているエネルギー固有状態の  $\zeta(r)$  の特徴と一致する。また異なる副格子に属するサイト対における  $\zeta(r)$  は、ひとつの副格子上にダブロン、もうひとつの副格子上にホロンが完全に無秩序に存在している場合の値 ( $\frac{2}{N} \times \frac{2}{N} = 0.0059$ ) とほぼ一致しており、これも上記の描像により説明可能である。

次に central ピークの起源について考える。光吸収強度を考察するには、基底状態からの遷移モーメントと、状態密度 (DOS) を考察することが重要である。最初に遷移モーメントに関して議論を行う。基底状態から様々なエネルギー固有状態への遷移モーメントを数値計算によって求めた。表 3.1~3.5 に 2次元 18 サイトにおける基底状態から特徴的な構造に対応するエネルギー固有状態への遷移モーメントを示す。表 3.1 には基底状態から central ピーク内、表 3.2 には基底状態から低エネルギー側 broad ピーク内、表 3.3 には基底状態から高エネルギー側 broad ピーク内、表 3.4 には基底状態から  $E_p - U = -5$  付近、表 3.5 には基底状態から  $E_p - U = 5$  付近、の3つのエネルギー固有状態への遷移モーメントを示す。表 3.1~3.5 より、central ピーク内の

表 3.1. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001$  における基底状態から central ピーク内のエネルギー固有状態への遷移モーメント。

$U^{-1}$	$E_p - U$	遷移モーメント
0.001	-0.0039	$8.029 \times 10^{-4}$
0.001	-0.0036	$2.782 \times 10^{-4}$
0.001	-0.0028	$1.138 \times 10^{-5}$

表 3.2. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001$  における基底状態から低エネルギー側の broad ピーク内のエネルギー固有状態への遷移モーメント。

$U^{-1}$	$E_p - U$	遷移モーメント
0.001	-2.904	$2.71 \times 10^{-5}$
0.001	-2.903	$3.931 \times 10^{-5}$
0.001	-2.902	$2.43 \times 10^{-6}$

表 3.3. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001$  における基底状態から高エネルギー側の broad ピーク内への基底状態との遷移モーメント。

$U^{-1}$	$E_p - U$	遷移モーメント
0.001	2.815	$5.128 \times 10^{-5}$
0.001	2.814	$6.43 \times 10^{-6}$
0.001	2.824	$1.0811 \times 10^{-4}$

表 3.4. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001$  における基底状態から  $E_p - U = -5$  付近のエネルギー固有状態への遷移モーメント。

$U^{-1}$	$E_p - U$	遷移モーメント
0.001	-5.087	$3.669 \times 10^{-5}$
0.001	-5.093	$1.11506 \times 10^{-4}$
0.001	-5.083	$5.9 \times 10^{-6}$

$|q_x^{(H)}| = |q_y^{(H)}| = |q_x^{(D)}| = |q_y^{(D)}| \simeq \pi/2$  を持つエネルギー固有状態は他の状態よりも一般的に遥かに大きい遷移モーメントを持つことがわかる。それゆえ central ピークに見

表 3.5. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001$  における基底状態から  $E_p - U = 5$  付近のエネルギー固有状態への遷移モーメント。

$U^{-1}$	$E_p - U$	遷移モーメント
0.001	4.913	$5.14 \times 10^{-6}$
0.001	4.914	$1.0 \times 10^{-8}$
0.001	4.912	$2.0 \times 10^{-7}$

られる鋭いピーク構造の起源の一部は、これらの状態が持っている大きな遷移モーメントにあることがわかる。この巨大な遷移モーメントは以下に示すように、これらのエネルギー固有状態における特徴的な電子構造に関連づけることができる。式 (2.1.3b) より  $H_{e-p}$  は反並行スピン対の電子を最近接サイトに移動させ、最近接ホロン・ダブロン対を作る作用をする。それゆえ、基底状態とエネルギー固有状態の遷移モーメントは以下での2つの場合において大きくなることが予想される。(i) エネルギー固有状態のスピン構造と基底状態における AF スピン構造が似ている場合。(ii) ダブロンとホロンが最近接サイトに存在している確率を示す  $\zeta(1)$  の値が大きい場合。central ピークに寄与しているエネルギー固有状態においては、異なる副格子にダブロンとホロンが存在する構造のために、 $\zeta(1)$  の値は他のエネルギー固有状態よりも遥かに大きい。よって、(ii) の条件を満たすために、central ピークに寄与するエネルギー固有状態が大きな遷移モーメントを持つと考えられる。

次に状態密度 (DOS) に関して議論を行う。 $U^{-1} = 0$  で、サイト数が無限大の極限における状態密度 (DOS) を数値的に求めた結果を Fig.3.12 に示す。 $5.0 \times 10^{-4}$  の幅でブロードニングを行った。ここでは、スピン散乱、ホロンとダブロン衝突などの  $O(1/N)$  の効果を無視している。

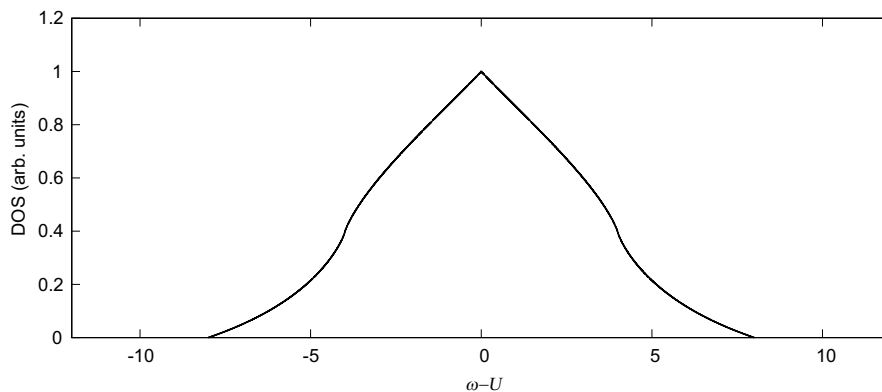


Fig. 3.12.  $U$  が無限大かつサイト数が無限大の場合における状態密度 (DOS)。 $5.0 \times 10^{-4}$  の幅でブロードニングを行っている。

この時、 $\omega = U$  における状態密度は発散する。central ピークはこの発散にも由来している。この発散は以下のように理解することができる。基底状態における全運動量が0

であるので、光励起可能な状態も全運動量  $k = 0$  となる。それゆえ、 $\mathbf{q}^{(H)} = \mathbf{q}^{(D)} + \mathbf{q}^{(\text{spin})}$  が成り立つ。ここで、 $|q_x^{(\text{spin})}| = |q_y^{(\text{spin})}| = \pi$  のとき、 $E^{(\text{CTT})}(\mathbf{q}^{(H)}, \mathbf{q}^{(D)}) = 0$  が  $\mathbf{q}^{(H)}, \mathbf{q}^{(D)}$  の値に関わらず成り立ち発散する。Fig.3.12 からわかるように、 $\omega = \pm 2.7$  付近において2つのショルダーが見られる。このことから  $\alpha(\omega)$  の broad ピークは状態密度のショルダーから生じていると考えられる。

ほとんど同じ準運動量をもったエネルギー固有関数における縮退はスピン間相互作用によってとかれ、これらの状態間のエネルギー差はスピン間相互作用定数である  $J = 4U^{-1}$  に比例する。この縮退がとけることによるエネルギー固有値の分裂が central ピークの幅の起源であると考えられる。実際、 $U^{-1}$  が非常に小さい領域を除いて、central ピークの幅はほとんど  $U^{-1}$  に比例している。これは TFWM や FID におけるスピン緩和時間の  $U^{-1}$  依存性とも一致する [47]。

### 3.1.2 比較的相関の弱い領域

次に、 $U^{-1} \gtrsim 0.02$  の比較的相関の弱い領域について考察する。Fig.3.1 からわかるように、この領域については非常に相関の強い領域で見られた  $\alpha(\omega)$  の特徴が失われる。central ピークは  $U^{-1}$  が増加するに伴って幅が広がって不鮮明になり、central ピーク以外においても  $U^{-1}$  の依存性が顕著になっている。この結果を理解するために、2次元 18 サイトにおける様々な  $U^{-1}$  での central ピーク領域内、低エネルギー側の broad ピーク領域内、高エネルギー側の broad ピーク領域内のエネルギー固有関数における  $\zeta(r), \eta(r)$  を計算し、これをそれぞれ Fig.3.13 ~ 3.15 に示す。まず central ピークに

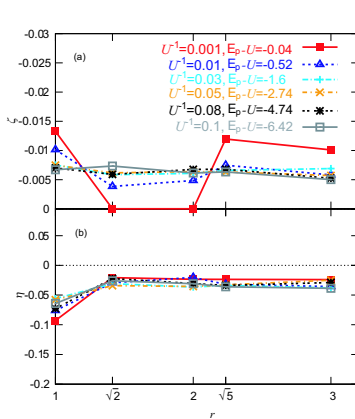


Fig. 3.13. 2次元 18 サイト、様々な  $U^{-1}$  における central ピーク内でのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

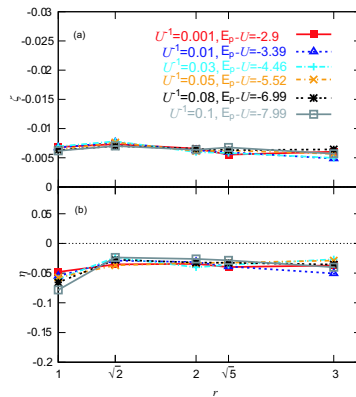


Fig. 3.14. 2次元 18 サイト、様々な  $U^{-1}$  における低エネルギー側の broad ピーク内でのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

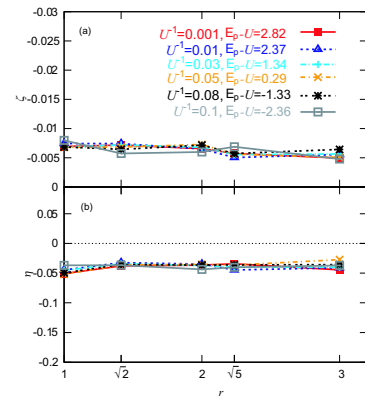


Fig. 3.15. 2次元 18 サイト、様々な  $U^{-1}$  における高エネルギー側の broad ピーク内でのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

ついて議論する。 $U^{-1}$  が極めて小さいときに見られた特徴的な電荷構造は  $U^{-1} = 0.01$  付近で失われ、 $U^{-1} \gtrsim 0.01$  においては、 $\zeta(r)$  はほぼ一定となる。その結果、central ピークに寄与するエネルギー固有状態の遷移モーメントは、他の状態と同程度になり、その結果 central ピークはしだいにゆるやかになる。低エネルギー側の broad ピークおよび高エネルギー側の broad ピークに寄与するエネルギー固有状態の  $\zeta(r)$  および  $\eta(r)$  はほぼ一定で、 $U^{-1}$  依存性は弱い。

$U^{-1} = 0.1$  においても  $\alpha(\omega)$  のピークに寄与する様々なエネルギー固有状態の相関関数を計算した。Fig.3.16 に 2次元 26 サイト、 $U^{-1} = 0.1$  における、低エネルギー領域における 2つの小さなピークのエネルギーに等しいエネルギー固有値  $E_p - U = -3.79, -3.37$  を持つエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$  を示す。

Fig.3.17 に 2次元  $N = 26$  および  $N = 18, U^{-1} = 0.1$  における  $\alpha(\omega)$  を示す。この図からわかるように、 $N = 26$  と  $N = 18$  において、定性的に同じ  $\alpha(\omega)$  が得られている。Fig.3.18~3.22 に Fig.3.17 に示した  $N = 18$  における  $\alpha(\omega)$  の特徴的なピーク (A,B,C,D,E) のエネルギーでのエネルギー固有状態における  $\zeta(r), \eta(r)$  をそれぞれ示す。また、これらのエネルギー固有状態と基底状態との遷移モーメントを計算し、表

3.6 示す。

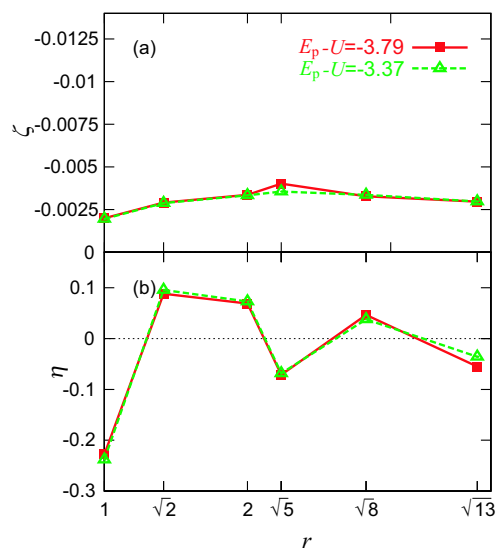


Fig. 3.16. 2次元26サイト  $U^{-1} = 0.1$  における  $E_p - U = -3.79, -3.37$  のエネルギー固有状態における (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

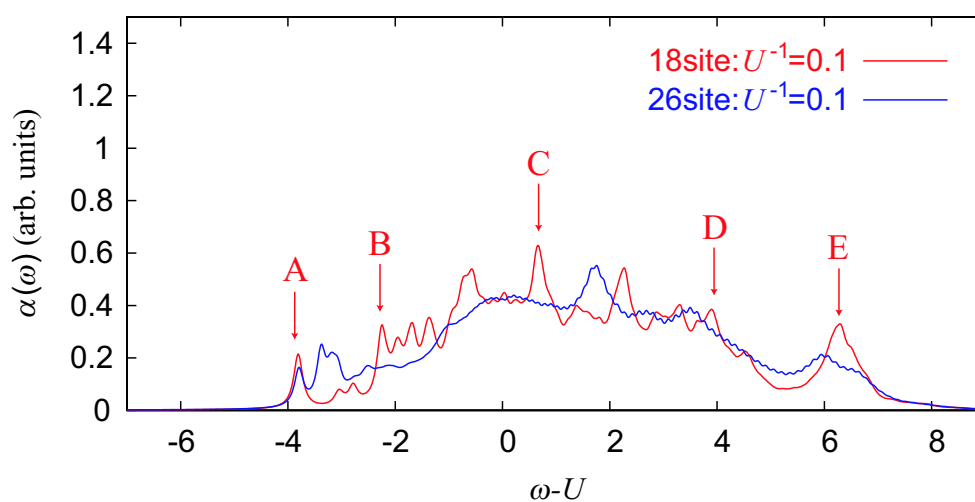


Fig. 3.17. 2次元18,26サイト,  $U^{-1} = 0.1$  における  $\alpha(\omega)$ 。  $\epsilon = 0.1$  を用いた。



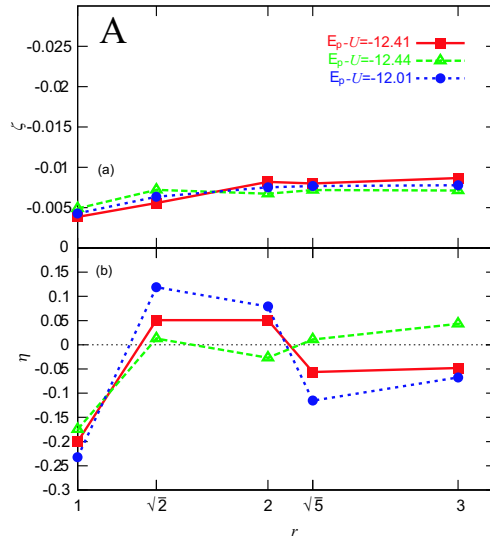


Fig. 3.18. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における、ピーク A 付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

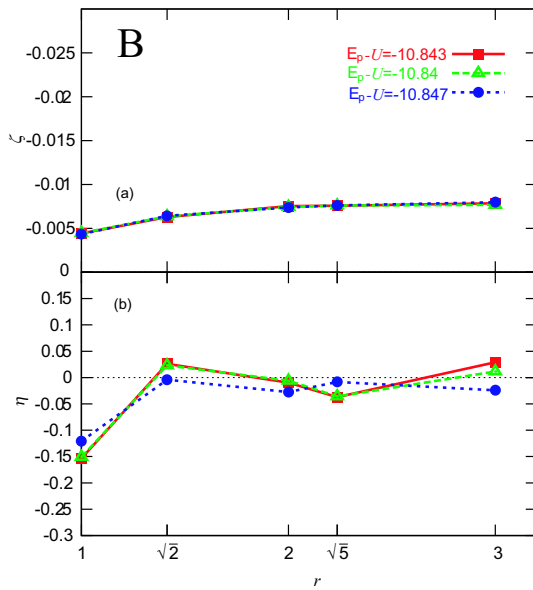


Fig. 3.19. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における、ピーク B 付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

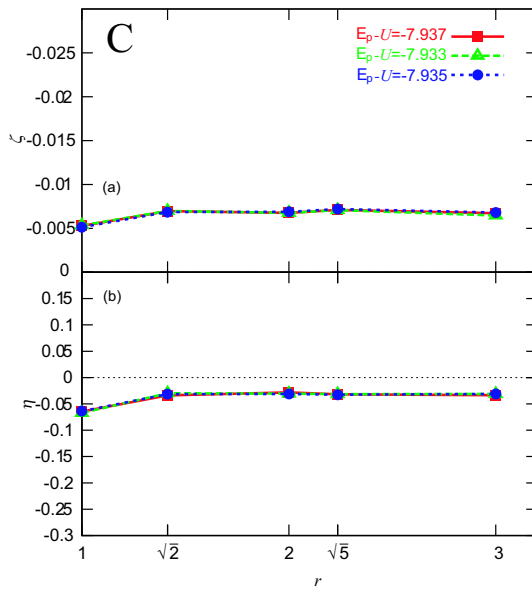


Fig. 3.20. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における、ピーク C 付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

前述したように、 $U^{-1} \lesssim 0.01$  領域においては計算された固有関数の全てにおいて  $\eta(r)$  はほとんど一定であった。しかしながら Fig.3.16~3.22 からわかるように低エネルギー領域においていくつかのエネルギー固有状態は AF スピン秩序を持つようになる。これはスピン間相互作用エネルギーを低下させるためと考えられる。他のエネルギー領

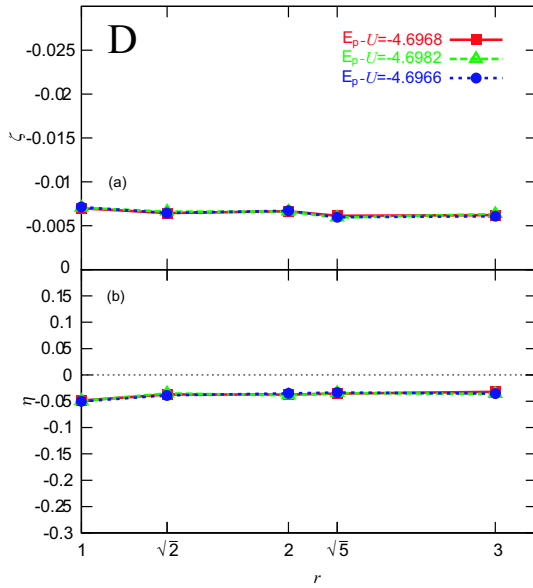


Fig. 3.21. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における、ピーク D 付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

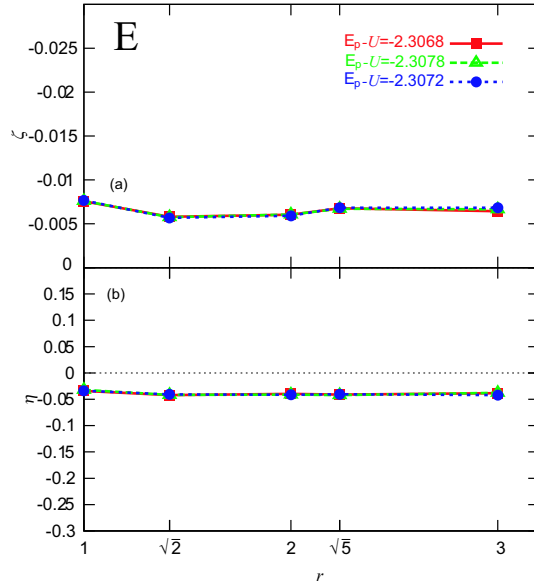


Fig. 3.22. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における、ピーク E 付近のエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

域においては、 $\zeta(r), \eta(r)$  もほぼ一定となっている。この AF スピン秩序が現れるエネルギー領域は  $U^{-1}$  が増加するにつれ、拡大する。表 3.6 よりこの基底状態と光励起状態の遷移モーメントの大きさは、低エネルギー側のピーク A における一つのエネルギー固有状態において一番大きく、他の状態よりも 20 倍以上も大きい。この大きな遷移モーメントがピーク A の起源であると考えられる。

以上の結果は以下のように解釈することができる。前述のように  $U^{-1} \lesssim 0.01$  においては、電荷移動項  $P_1 \hat{T} P_1$  が支配的であり、その結果、ほぼ同じホロンとダブロン準運動量をもつ膨大な数のエネルギー固有状態がほぼ縮退している。 $U^{-1} \gtrsim 0.02$  においては、励起状態に対するスピン間相互作用の効果が重要になり、Fig.3.16 および 3.18 で見られたように、低エネルギー領域でのエネルギー固有状態のいくつかは、スピン

表 3.6. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における様々なピーク位置でのエネルギー固有状態と基底状態との遷移モーメント。エネルギー固有値の小さい順に左から右へと書いた。

$U^{-1}$	ピーク	遷移モーメント	遷移モーメント	遷移モーメント
0.1	A	$5.5393 \times 10^{-3}$	$5.58 \times 10^{-10}$	$1.13 \times 10^{-13}$
0.1	B	$2.6074 \times 10^{-4}$	$1.3266 \times 10^{-5}$	$1.0146 \times 10^{-5}$
0.1	C	$1.0152 \times 10^{-5}$	$8.8499 \times 10^{-5}$	$1.3493 \times 10^{-4}$
0.1	D	$7.2322 \times 10^{-6}$	$9.4643 \times 10^{-6}$	$2.3727 \times 10^{-7}$
0.1	E	$1.4031 \times 10^{-5}$	$2.2637 \times 10^{-5}$	$4.9233 \times 10^{-6}$

間相互作用エネルギーを低下させるために AF スピン秩序をもつようになる。その結果、強相関領域に特徴的な準縮退がとかれ、3.1.1 節で述べた、準縮退構造に由来する強相関領域における光吸収スペクトルの特徴が失われる。 $U^{-1} \gtrsim 0.02$  において、 $\alpha(\omega)$  の  $U^{-1}$  依存性が、central ピーク 以外においても顕著になることも、この AF スピン秩序の出現によって理解することができる。

### 3.1.3 1次元系

次に2次元系と1次元系の光吸収スペクトルの比較を行うために、1次元系 26 サイトにおける光吸収スペクトルの計算を行った。 $\alpha(\omega)$ における $U^{-1}$ の依存性は $U^{-1} \lesssim 0.1$ 領域においては非常に弱いために、 $U^{-1} = 0.01$ を強相関領域として代表させる。Fig.3.23に $U^{-1} = 0.01$ における $\alpha(\omega)$ を示す。

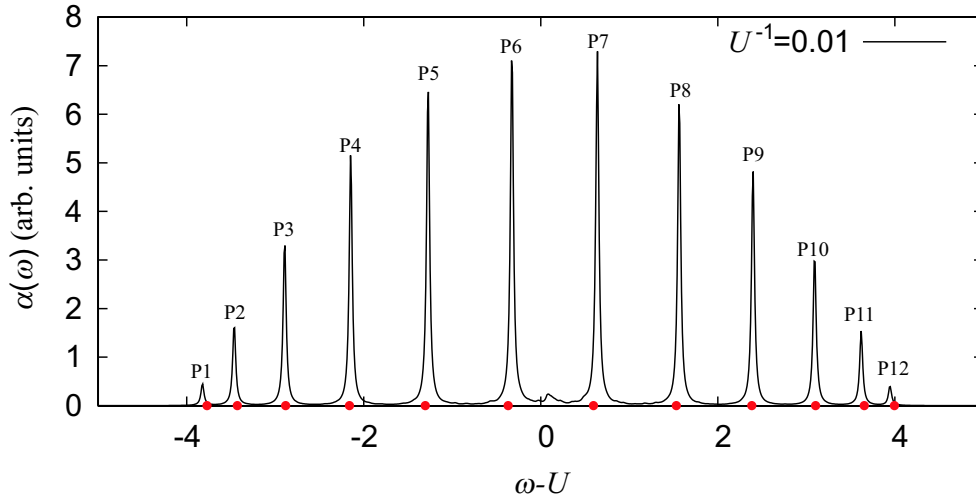


Fig. 3.23. 1次元 26 サイト、 $U^{-1} = 0.01$ における $\alpha(\omega)$ 。 $\epsilon = 0.02$ を用いた。

Fig.3.23 より、12本の主要なピークがあることがわかる。この主要なピークは Lorentzian でピークの幅は式 (2.3.1) にある  $\epsilon$  と同じである。また  $\omega - U = 0$  付近に見られる非常に小さいピークは、電荷、スピン自由度が共に有限の運動量を持つ状態への遷移のために生じていることが解っている [23, 24]。

さらに、いくつかの主要なピークのピークエネルギーにおけるエネルギー固有状態を計算をした。それぞれのエネルギー固有状態における遷移モーメントの大きさは、対応する主要なピークの総遷移モーメントと同一であった。それゆえ、それぞれの主要なピークはたった一つのエネルギー固有状態への励起状態によるものである。この離散的な吸収スペクトルは有限サイズ効果の結果である。しかしながら、 $H_{\text{eff}}^{(1)}$  の次元数は2次元、1次元とも  $10^7$  のオーダーであり、2次元系においては同じ  $\epsilon$  の値を用いても連続的なスペクトルが得られている。それゆえ、この少数系での  $\alpha(\omega)$  における離散性は1次元系に特有のものであるとみなすべきである。

1次元 26 サイトにおいては、12 個の離散的なピークがあり、エネルギーの低い方から  $i$  番目のピークを  $P_i$  と表す。P1, P6, P11 に寄与するエネルギー固有状態の電荷相関関数  $\zeta(r)$  および射影スピン相関関数  $\tilde{\eta}(r)$  を Fig.3.24 に示す。この図から 12本のそれぞれのピークのエネルギー固有状態における  $\tilde{\eta}(r)$  はほとんど差がないことがわかった。それにも関わらず  $\zeta(r)$  は著しく異なっている。これらのエネルギー固有状態においては、スピンと電荷の構造にほとんど相関がない。仮に、スピン・電荷分離が成立しているとすれば、以下の式のように波動関数が電荷波動関数とスピン波動関数の積となる、

$$|\Psi\rangle = |\phi_c\rangle|\phi_s\rangle, \quad (3.1.8)$$

ここで  $|\phi_c\rangle$  は電荷波動関数、 $|\phi_s\rangle$  はスピン波動関数を表す。このとき  $\zeta(r) = \langle\phi_c|d_n d_m|\phi_c\rangle$ ,  $\tilde{\eta}(r) = \langle\phi_s|\sum_{l=0}^2 \tilde{P}_l \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{S}_{r+l} \tilde{P}_l|\phi_s\rangle$  となる。その結果、 $\zeta(r)$  と  $\tilde{\eta}(r)$  はお互いに影響を及ぼさない。従って、 $\zeta(r)$  と  $\tilde{\eta}(r)$  に相関がないことは、スピン・電荷分離が成立している場合に特徴的なことであり、Fig.3.24 に示した結果はスピン・電荷分離がほぼ厳密に成立していることを示している。このことはさらに、特定のスピン波動関数を持ったエネルギー固有状態だけが光励起されることを意味する。それゆえ、ごく小さい一部のエネルギー固有状態だけが基底状態からの遷移モーメントを独占することになる。これが離散的な吸収スペクトルの原因である。

2次元系の場合と同じ議論により、1次元系において電荷移動項が支配的な場合、エネルギー固有値も

$$E(q^{(H)}, q^{(D)}) = -2 (\cos q^{(H)} + \cos q^{(D)}), \quad (3.1.9)$$

と書くことができる。ここで  $q^{(H)}$  および  $q^{(D)}$  は、ホロンおよびダブロンの運動量である。ここで、さらにスピン・電荷分離が成立すると仮定すると、スピン散乱が発生しないために、

$$q^{(H)} = \frac{2\pi}{N} i^{(H)}, \quad (3.1.10)$$

$$q^{(D)} = \frac{2\pi}{N} i^{(D)}, \quad (3.1.11)$$

となる。ここで  $i^{(H)}$  は  $-\frac{N}{2} < i^{(H)} \leq \frac{N}{2}$  を満たす整数である。さらに、スピン・電荷分離の結果、運動量 0 の基底状態と特定のスピン構造のスピン波動関数をもつ状態のみ

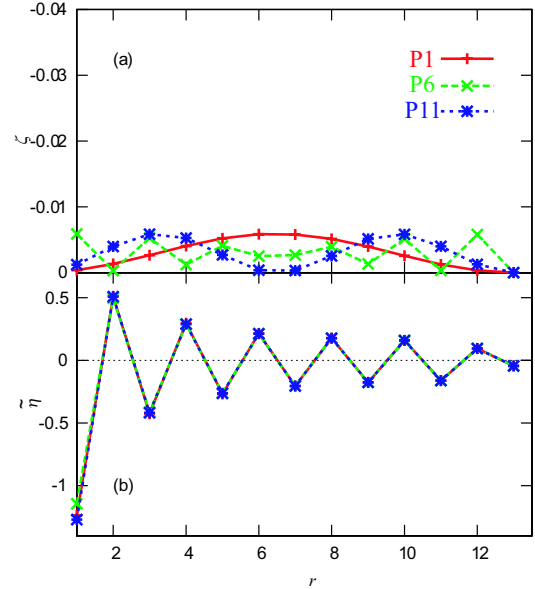


Fig. 3.24. 1次元 26 サイト  $U^{-1} = 0.01$  における P1,P6,P11 でのエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \tilde{\eta}(r)$ 。

が励起されるために、光励起状態のスピン運動量は0となる。対称性より光励起状態の全運動量は0だから

$$\begin{aligned} q^{(H)} + q^{(D)} &= 0, \\ i^{(H)} &= -i^{(D)}, \end{aligned} \quad (3.1.12)$$

が成立する。これを式(3.1.9)に代入すれば、

$$\begin{aligned} E(q^{(H)}, q^{(D)}) &= -4 \cos \frac{2\pi}{N} i^{(H)}, \\ i^{(H)} &= -12, -11, \dots, 0, \dots, 12, 13 \end{aligned} \quad (3.1.13)$$

となる。 $E(q^{(H)}, q^{(D)})$ をFig.3.23に赤丸で示した。Fig.3.23からわかるように、主要なピークの位置をうまく説明できることがわかる。この議論は2次元系においては、電荷移動項が支配的となる極めて  $U$  が大きい領域でのみ成立するのであるが、前述のように  $\alpha(\omega)$  はほとんど  $U^{-1}$  に依存せず、 $U^{-1} = 0.1$  においても式(3.1.13)はピーク的位置を極めて正確に再現する。これは、1次元系においては、光励起、緩和過程において、スピン自由度が事実上凍結されており、スピン間相互作用の効果は無視できるためである。この性質もまたスピン・電荷分離の現われであると言える。

このようにして、1次元系におけるスピン・電荷分離の結果、 $\alpha(\omega)$  が1次元系と2次元では非常に違ったものになっている。ここで注目すべきことは、光吸収スペクトルは、1次元と2次元系のスピン-電荷の相互作用の違いが敏感に反映するという点である。

ここで1次元系と2次元系における光吸収スペクトルの違いが、どのようにしてレーザーパルスによって励起された状態のダイナミクスに現れるかについて説明しておく。式(2.1.3b)からわかるようにパルス光励起後すぐに、ホロンとダブロンが最近接サイトに生成され、AFスピン秩序は局所的に破壊されるだけである。それゆえ、パルス光励起直後の光励起状態はAFスピン秩序を持っている。しかしこの結果は、以下に示すように、2次元系においてエネルギー固有状態がAFスピン秩序を持っていないという事実と矛盾しない。2次元系において、ほとんど同じダブロンとホロンの準運動量を持っている膨大な数のエネルギー固有状態がほぼ縮退しており、エネルギー固有値のずれは前述したように  $O(1/N)$  である。これらの状態はそれぞれ違うスピン構造を持っている。ダブロンとホロンが一つずつある1光子励起状態の全てのスピン配置は、このほとんど縮退した状態すべてによって張られたヒルベルト空間に含まれる。それゆえ、これらのほとんど縮退したエネルギー固有状態の線形結合によってAFスピン秩序を持った状態を得ることができる。パルス励起においては、膨大な数のエネルギー固有状態がコヒーレントに励起される。そのため、非常に狭いエネルギー幅で共鳴励起された場合でさえ、光励起直後の励起状態は、AFスピン秩序を持っている。しかしながら、多数の異なるスピン構造を持ったエネルギー固有状態が光励起されるため、緩和が起こり、その結果、AFスピン秩序が時間の経過とともに弱くなる。このことはスピン・電荷分離により、特定のスピン構造を持った離散的なエネルギー固有状態しか光励起されない1次元系と対照的な振る舞いである。このような、スピン・

電荷分離に由来する特異な遷移モーメントの分布の結果、 $\tilde{\eta}(r)$  はほとんど時間とともに変化せず、AF スピン秩序の大きさはほとんど変わらない。この結果を以下のように確かめた。 $|\psi(\omega)\rangle$  のフーリエ変換は以下の式で与えられ、

$$|\psi(\omega)\rangle = \int_0^\infty |\psi(\tau)\rangle e^{i(\omega-i\epsilon)\tau} d\tau \quad (3.1.14)$$

ここで、 $|\psi(\tau)\rangle$  は時刻 0 に超短パルスで励起したときの光励起状態、 $\epsilon$  はダンピング項である。 $|\psi(\omega)\rangle$  はエネルギー固有値  $\omega$  を中心とする幅  $\epsilon$  内の、コヒーレントに励起した状態に相当する。次に 2次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.001$  において様々な  $\omega$  での  $|\psi(\omega)\rangle$  を計算し、その  $\zeta(r), \eta(r)$  を求めた。これを Fig.3.25~3.27 に示す。Fig.3.25 ~ 3.27 よ

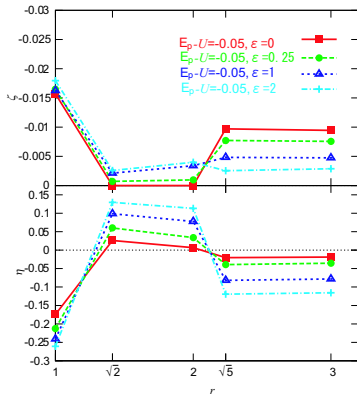


Fig. 3.25. 2次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.001$ 、 $\omega = -0.05$ (central ピーク内に対応) の  $|\psi_p(\omega)\rangle$  における様々なダンピング幅  $\epsilon$  における  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

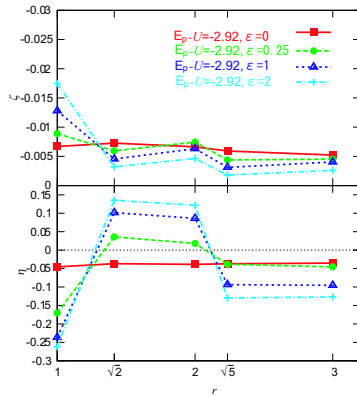


Fig. 3.26. 2次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.001$ 、 $\omega = -2.92$ (低エネルギー側 broad ピーク内に対応) の  $|\psi_p(\omega)\rangle$  における様々なダンピング幅  $\epsilon$  における  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

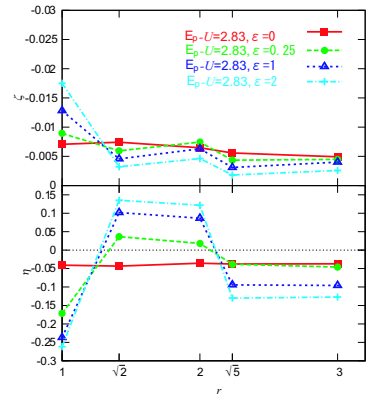


Fig. 3.27. 2次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.001$ 、 $\omega = 2.83$ (高エネルギー側 broad ピーク内に対応) の  $|\psi_p(\omega)\rangle$  における様々なダンピング幅  $\epsilon$  における  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

り、どの領域においても  $\epsilon = 0.25$  程度のエネルギー幅のエネルギー固有状態の線形結合を取ることにより AF スピン秩序をつくり出すことができ、これは準縮退描像が成立しているを示す。このように、1次元系と2次元系における本質的な光吸収スペクトル違いは緩和過程の違いに密接に関係づけることができ、これらの結果を数値計算によって確認した。超短パルスによる結果は文献 [52] において詳細な議論がなされている。

## 3.2 電荷束縛効果 (拡張ハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニアンを用いた解析)

これまで  $V = 0$  のハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニアンを用いてきたが、この節においては、拡張ハバードハミルトニアンにおける有効ハミルトニアンを用いて光励起状態における最近接サイト間クーロン相互作用がもたらす電荷束縛効果について議論していく。

### 3.2.1 強相関領域

初めに非常に相関が強い場合を考える。Fig.3.28 に  $U^{-1} = 0.001$  での様々な  $V$  における  $\alpha(\omega)$  を、Fig.3.29 に  $U^{-1} = 0.001$  における FID の信号強度  $I_{\text{FID}}(\tau)$  の  $V$  依存性を示す。Fig.3.28 より、 $V$  が増加するに従って central ピーク が鈍くなりレッドシフトすることがわかる。同時に低エネルギー側の broad ピーク が  $V$  の増加に伴って急激に成長し、 $V \gtrsim 4$  においては支配的なピークとなる。後述するように、このピークはダブロンとホロンの束縛効果によって生じるものであり、その起源は central ピークのそれとは異なる。この2つのピークは  $V \approx 2$  程度で同程度となりスペクトルの構造は  $V \lesssim 2$  と  $V \gtrsim 2$  では本質的に異なった形状になっている。

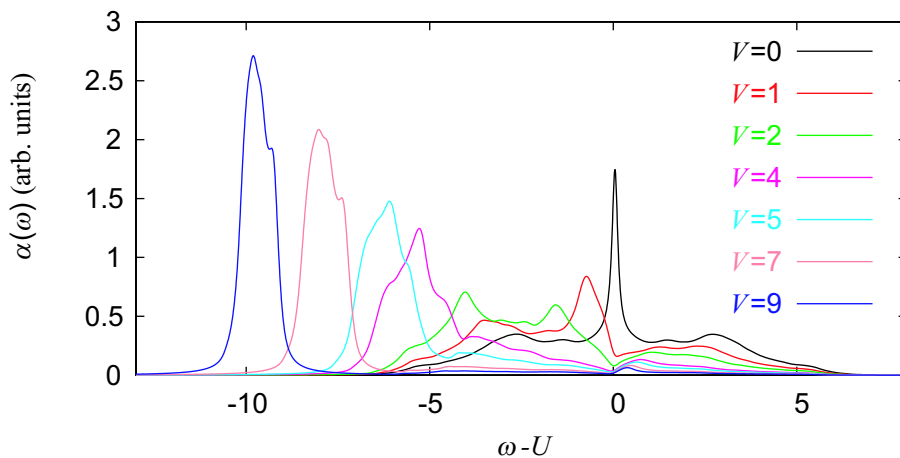


Fig. 3.28. 2次元26サイト、 $U^{-1} = 0.001$ での様々な  $V$  における光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$ 。  $\epsilon = 0.1$  を用いた。



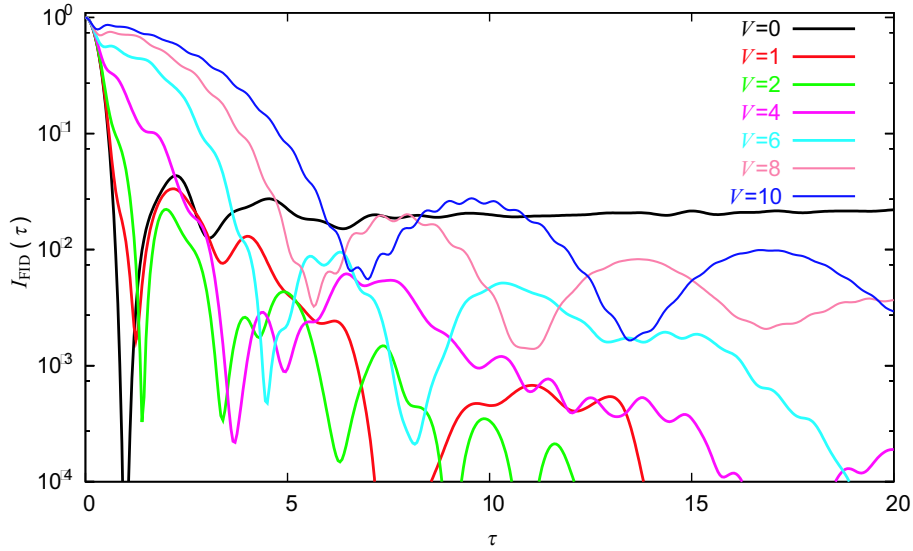


Fig. 3.29. 2次元26サイト、 $U^{-1} = 0.001$ での様々な $V$ における $I_{\text{FID}}$ 。

前述のように、Fig.3.29より、 $V = 0$ における $I_{\text{FID}}(\tau)$ の特徴の物理的な起源は以下のとおりである。 $\tau \lesssim 1$ における $I_{\text{FID}}(\tau)$ の急激な減少と $\tau \gtrsim 5$ における指数関数的減衰からなる2段階の緩和が見られ、前者は電荷の拡散による緩和、後者はスピン緩和にそれぞれ対応している。 $1 \lesssim \tau \lesssim 5$ における振動は量子ビートである。 $V \lesssim 2$ においてはこの特徴的な2段階の緩和現象が確認でき、 $V$ を増加させるに従ってスピン緩和が早くなる。これは $\alpha(\omega)$ におけるcentralピークが鈍くなることに対応する。 $V \gtrsim 4$ になると2段階の緩和が見られなくなる。これは新しく生じたピークが支配的になり、 $V = 0$ において見られた特徴的な吸収スペクトルが、最近接サイト間クーロン相互作用によって破壊されるためである。 $V \gtrsim 2$ においては、 $V$ が増加するにつれて $I_{\text{FID}}(\tau)$ の減衰は遅くなっている。これは $V$ が増加するにつれて $\alpha(\omega)$ における支配的なピークがより鋭くなる変化に対応している。しかしながら、Fig.3.29に見られるように、 $V$ が10に達し、ピークが非常に鋭くなっても、 $I_{\text{FID}}(\tau)/I_{\text{FID}}(0)$ は $\tau \gtrsim 10$ においては0.01よりも小さくなっていることがわかる。このことは非常に多くのエネルギー固有状態がこの支配的ピークに寄与していることを示している。実際このピークのスペクトル領域において多くのエネルギー固有状態を得ることができた。これらのエネルギー状態の物理的性質については後述する。さらにこれらの状態への基底状態からの遷移モーメントは、この支配的ピークの全体の遷移モーメントに比べて非常に小さく、例えば $V = 8$ においては、ひとつのエネルギー固有状態の遷移モーメントは最大でも全体の0.1%にも満たなかった。この結果はFIDの結果と一致している。非常に $V$ が大きい領域において、 $I_{\text{FID}}(\tau)$ に振動が見られる。Fig.3.28からわかるように、 $V$ が非常に大きい領域において支配的なピークにはショルダーや小さいピークが見られる。このことは、この支配的ピークが幾つかのピークの重ね合わせになっていることを強く示唆している。ピークと一番大きなショルダーとのエネルギー差は0.48であり、 $I_{\text{FID}}(\tau)$ の周波数の0.47(周期13.3)とほぼ一致している。このことより、この振動は複数のピーク構造から生じているものだと結論づけることができる。

これらの特徴的な  $\alpha(\omega)$  や  $I_{\text{FID}}(\tau)$  の  $V$  依存性を理解するために、光吸収スペクトルの主要な構造のエネルギーに対応するエネルギー固有状態を求めた。まず最初に、central ピークに寄与しているエネルギー固有状態について考察する。Fig.3.30 に、2次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.001$  での、様々な  $V$  におけるこれらのエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$  を示す。Fig.3.30 より、前述した  $V = 0$  の場合の同じ副格子に属しているペア同士での  $\zeta(r)$  がほとんどゼロになるという特徴的な電荷構造が、 $V$  が 0 から 2 に増加するに従って急速に失われてゆくことがわかる。 $V \gtrsim 2$  においては、この特徴的な電荷構造をもつエネルギー固有状態を得ることができなかった。

次に、 $V \gtrsim 4$  における支配的なピーク構造に寄与しているエネルギー固有状態と、この支配的ピークに連続的に変化していく、 $V \lesssim 2$  における低エネルギー側の broad ピークに寄与しているエネルギー固有状態について考察する。Fig.3.31 に  $U^{-1} = 0.001$  での様々な  $V$  における、これらのピークエネルギーでのエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$  を示す。Fig.3.31 より、 $\zeta(1)$  の絶対値が  $V$  を増加させてゆくに従って増加してゆき、 $\zeta(r)$  は  $V \gtrsim 2$  において減少関数になっていることがわかる。 $V \gtrsim 5$  においては、 $\zeta(r)$  は  $r \geq \sqrt{8}$  の長距離成分においてほとんど 0 になっている。このことは光励起された電荷が束縛していることを示している。一方、 $\eta(r)$  は  $V$  に対して、ほとんど一定である。このことからスピンと電荷の相関が非常に弱いことがわかる。エネルギー固有状態の計算は支配的ピークだけではなく、ショルダーのエネルギーでの計算も行った。それぞれの微細構造について、ほとんど縮退したエネルギーをもつエネルギー固有状態を多数得ることができた。Fig.3.32 に 2次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.001, V = 5$  における支配的ピークの  $\zeta(r), \eta(r)$  を、Fig.3.33 に支配的ピークのショルダーにおける  $\zeta(r), \eta(r)$  を示す。Fig.3.32 および Fig.3.33 より、各々の微細構造のエネルギーに殆ど縮退したエネルギー固有状態における  $\zeta(r)$  は、ほとんど同一であり、 $\zeta(r)$  は単調に減少することがわかる。これは支配的なピークに寄与するエネルギー固有状態が、節を持っていない最低エネルギー束縛状態の電荷構造になっていることを示している。一方、 $\eta(r)$  はほとんど一定である。これらのほぼ縮退した状態間での  $\eta(r)$  の偏差は  $\zeta(r)$  よりも遥かに大きい。それゆえ、非常に  $V$  が大きい領域においても  $V = 0$  での強相関領域と同様に、エネルギー固有値は主に電荷構造によって決定され、電荷構造がほぼ同じで、スピン構造が異なる非常に多くの数のエネルギー固有状態がほとんど縮退していると結論づけることができる。

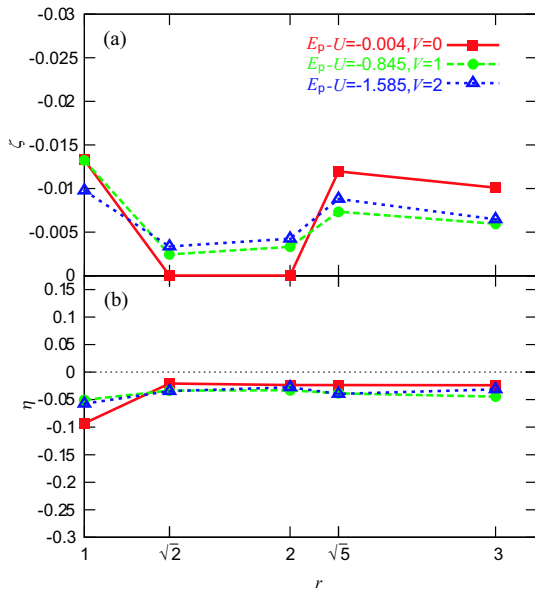


Fig. 3.30. 2次元18サイト,  $U^{-1} = 0.001$ での様々な  $V$  における central ピークのピークエネルギーにおけるエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

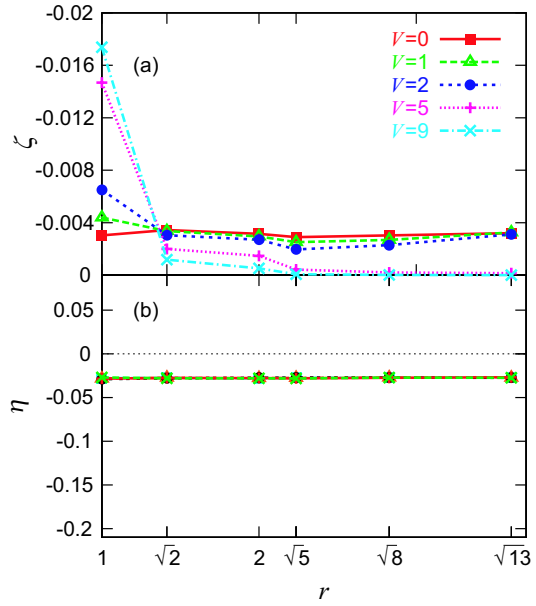


Fig. 3.31. 2次元26サイト,  $U^{-1} = 0.001$ での様々な  $V$  における支配的ピーク ( $V = 5, 9$ ) もしくは低エネルギー側の broad ピーク ( $V = 0, 1, 2$ ) エネルギーにおけるエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

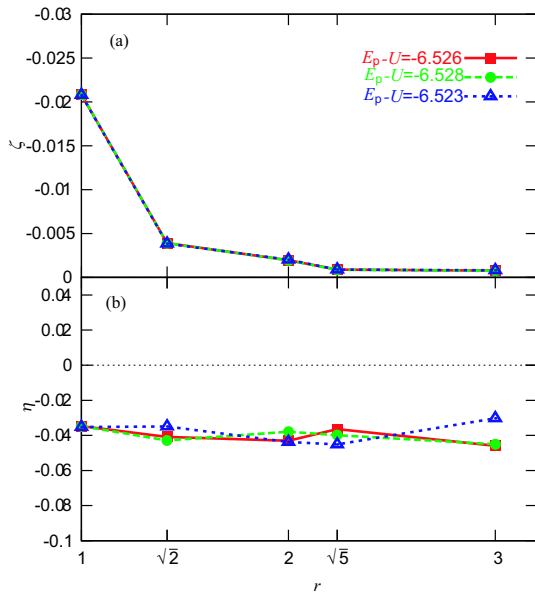


Fig. 3.32. 2次元18サイトにおける  $U^{-1} = 0.001, V = 5$  での支配的ピークのピークエネルギーにおけるエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

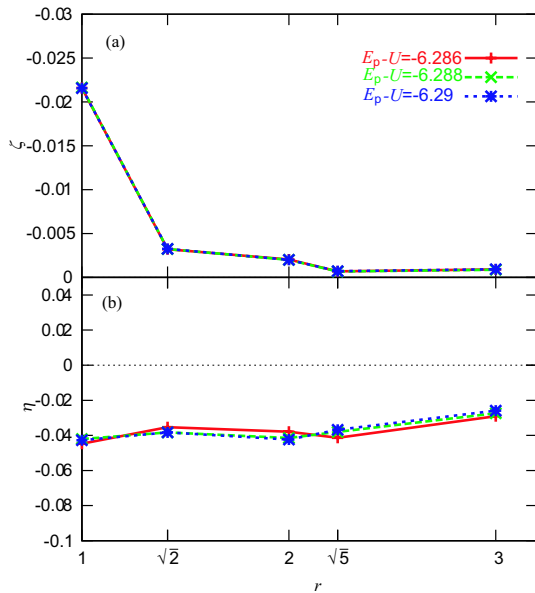


Fig. 3.33. 2次元18サイトにおける  $U^{-1} = 0.001, V = 5$  での支配的ピークのショルダーエネルギーにおけるエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

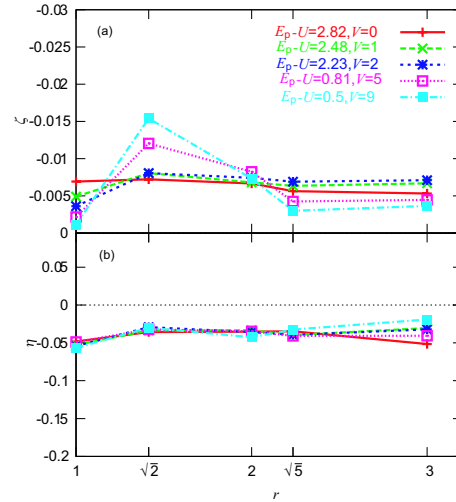


Fig. 3.34. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.001$  での様々な  $V$  における高エネルギー側 broad ピーク内のエネルギー固有状態における (a)  $\zeta(r)$ , (b)  $\eta(r)$ 。

次に支配的ピーク以外のピーク構造の電子状態を見てみる。Fig.3.34 に2次元18サイト、 $U^{-1} = 0.001$  での様々な  $V$  における高エネルギー側の broad ピーク内のエネルギー固有状態の  $\zeta(r)$ ,  $\eta(r)$  を示す。 $V \lesssim 2$  においては  $\zeta(r)$ ,  $\eta(r)$  はほぼ一定である。 $V \gtrsim 4$  において、支配的ピークの場合とは逆に  $V$  が大きくなるに従って、 $\zeta(1)$  が小さくなっていくのがわかる。 $\eta(r)$  は  $V$  に対してほとんど変化しないことがわかる。

次に、遷移モーメントについて考察する。表3.7に2次元18サイト  $U^{-1} = 0.001$  における、光吸収スペクトルの主要な構造のエネルギーにおけるエネルギー固有状態と基底状態との間の遷移モーメントを示す。 $V = 0$  において central ピークでのエネルギー固有状態が一番大きな遷移モーメントを持っているが、 $V \lesssim 2$  においては、central ピークでのエネルギー固有状態の遷移モーメントは、 $V$  を増すにつれ急激に減少する。 $V \gtrsim 4$  においては、支配的なピークでのエネルギー固有状態の遷移モーメントが、 $V$  を増すとともに大きくなり、 $V = 9$  においては他にピークの遷移モーメントと比較して30倍以上大きな値を持っている。しかし、前述のように単独の状態の遷移モーメントは、支配的ピークの総遷移モーメントの %0.1 にも満たない。さらに  $U^{-1} = 0.001$ ,  $V = 8$  における支配的ピークのピークエネルギーでの  $\epsilon$  の幅をつけた様々なエネルギー固有状態  $|\psi(\omega)\rangle$  の  $\zeta(r)$ ,  $\eta(r)$  を Fig.3.35 に示す。 $V$  が大きく電荷が束縛した状態においても Fig.3.35 より、 $\epsilon = 0.25$  程度のエネルギー幅のエネルギー固有状態の線形結合を取ることにより AF スピン秩序を作り出すことができることがわかる。このことから  $V$  が大きい領域においても、(i) エネルギー固有値は、ほぼ電荷構造によってのみ決まり、(ii) ほぼ同じ電荷構造をもつが異なったスピン構造を持つ、膨大な数のエネルギー固有状態がほぼ縮退している、という強相関領域の描像が成立していることがわかる。前述のように、この領域においても FID の大幅な減衰が見られる。この事実もこの結論

を支持する。

これらの結果から、 $V$  が十分に強い場合においては、エキシトン状態に類似した、ダブロンとホロンが束縛した状態が存在し、支配的なピークは、この束縛状態への励起によるものであることがわかった。しかしながら、2次元モット絶縁体においては非常に大数のダブロン・ホロン束縛状態がこの支配的なピークに寄与しており、たった数個のエキシトン状態だけで光学遷移モーメントをほぼ独占しているエキシトンの場合とは対照的である。

表 3.7. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001$  での様々な  $V$  における、低エネルギー broad ピーク内 (LBP), 支配的ピーク (DP), central ピーク内 (CP), 高エネルギー側 broad ピーク内 (HBP) でのエネルギー固有状態と基底状態との間の遷移モーメント。

$V$	LBP(DP)	CP	HBP
0	$6.9031 \times 10^{-3}$	$2.707 \times 10^{-1}$	$1.0694 \times 10^{-2}$
1	$4.6916 \times 10^{-3}$	$1.4319 \times 10^{-2}$	$9.0604 \times 10^{-3}$
2	$9.4092 \times 10^{-3}$	$1.4199 \times 10^{-2}$	$6.7646 \times 10^{-3}$
5	$3.1318 \times 10^{-2}$	$2.4868 \times 10^{-3}$	$1.7222 \times 10^{-3}$
9	$4.0425 \times 10^{-2}$	$1.1439 \times 10^{-3}$	$7.0956 \times 10^{-4}$

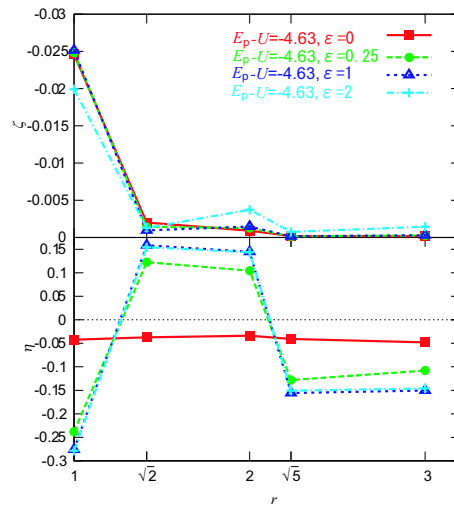


Fig. 3.35. 2次元 18 サイト  $U^{-1} = 0.001, V = 8$  における低エネルギー側の幅広いピークのピークエネルギーでのエネルギー固有状態の様々な  $\epsilon$  における  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

### 3.2.2 比較的相関の弱い領域

次に、より大きな  $U^{-1}$  の比較的相関の弱い領域の場合における  $\alpha(\omega)$  の  $V$  の依存性について考察する。Fig.3.36 に  $U^{-1} = 0.05$  での様々な  $V$  における  $\alpha(\omega)$  を示す。Fig.3.36 より、 $V \lesssim 2$  領域においては、 $V$  が増加するに従って、バンドの低(高)エネルギー側のピークが増加(減少)することがわかる。 $V = 0$  の  $\alpha(\omega)$  において  $\omega - U = -4.5, -3.9$  に2つの小さなピークある。この2つのピークは  $V$  が増加するに従って劇的に成長し、 $V = 4$  付近で支配的なピークへと成長する。これは低エネルギー側の broad ピークが支配的なピークに成長する  $U^{-1} = 0.001$  の場合とは異なっている。さらに  $V$  が強くなってくると、支配的なピークはより鋭くなりレッドシフトする。

このような  $\alpha(\omega)$  の  $V$  依存性を理解するために、主要な構造に寄与するエネルギー固有状態を計算した。ただし、この計算は、スピン間相互作用がより強調される  $U^{-1} = 0.1$  で行った。 $U^{-1} = 0.1$  の場合は、 $V \gtrsim 2.5$  においてはもともとの拡張ハバードモデルでは CDW 状態が基底状態になる。 $H_{\text{eff}}^{(1)}$  においては、 $H_{\text{eff}}^{(1)}$  が CDW 状態を記述できないために、この領域でもモット絶縁体が基底状態となる。そのため、この領域で  $H_{\text{eff}}^{(1)}$  を有効ハミルトニアンとして用いることができないのであるが、電荷束縛効果をより強調するために  $V = 9$  までの計算を行った。2次元 18 サイトで  $U^{-1} = 0.1$  での様々な  $V$  における  $\alpha(\omega)$  を Fig.3.37 に示す。 $V$  を細かく変化させて、どのピークがどのピークに連続的に変化していくかを解析し、連続的に変化していくピークに A, B, C などの名前を付けた。 $U^{-1} = 0.1$  での様々な  $V$  における Fig.3.37 のピーク A, ピーク B, central ピーク, ピーク C のエネルギーでのエネルギー固有状態における  $\zeta(r), \eta(r)$  をそれぞれ、Fig.3.38, 3.39, 3.40, 3.41 に示す。Fig.3.38 および Fig.3.39 より低エネルギー側でのピーク (A,B) のエネルギー固有状態は、 $V$  を増加させるに従って  $\zeta(1)$  が増加してゆき、 $\zeta(r)$  は  $V \gtrsim 2$  においては減少関数になっていることがわかる。 $V \gtrsim 5$  においては  $r \geq \sqrt{8}$  の長距離成分がほとんど0になっている。このことは低エネルギーピーク領域においては光励起された電荷が束縛していることを示している。支配的ピークに成長していく、ピーク A においては、 $\eta(r)$  は  $V = 0$  の場合において、前節で示したように AF スピン秩序があり、 $V$  を導入するに従って AF スピン秩序がわずかに強くなっているのがわかる。AF スピン秩序を持つ状態が、電荷が束縛した結果、大きな遷移モーメントを持ち、支配的なピークをもたらしていることがわかる。事実、これらの電荷が束縛した状態における、支配的ピークに寄与する光励起状態と基底状態の遷移モーメントは  $V = 9$  の場合、 $U^{-1} = 0.001$  での値に比べ  $U^{-1} = 0.1$  での値が約 10 倍程度大きい。しかし、この場合でも多くのエネルギー固有状態が支配的ピークに寄与することは変わらない。ほぼ縮退しているエネルギー固有状態間での  $\zeta(r)$  における偏差は  $U^{-1} \lesssim 0.01$  の場合よりも遥かに大きく、電荷構造とスピン構造が影響をおよぼしあっていることがわかる。このことから、 $U^{-1} \lesssim 0.01$  での特徴であった、縮退したエネルギーレベル構造が見られないことがわかる。次に、Fig.3.40,3.41 より高エネルギー側でのピーク (central,C) のエネルギー固有状態は  $\zeta(r)$  はほぼ一定であり、 $\eta(r)$  も一定で  $V$  を導入しても  $\zeta(r), \eta(r)$  どちらもあまり変化がないことがわかる。

Fig.3.42 に、 $V = 5$  での様々な  $U^{-1}$  における  $\alpha(\omega)$  を示す。 $U^{-1} \lesssim 0.02$  においては、

支配的ピークの幅はあまり変化しないが、 $U^{-1} \gtrsim 0.02$  においては、 $U^{-1}$  が増すにしたがって支配的ピークの幅が小さくなり、ピークが鋭くなっていることがわかる。

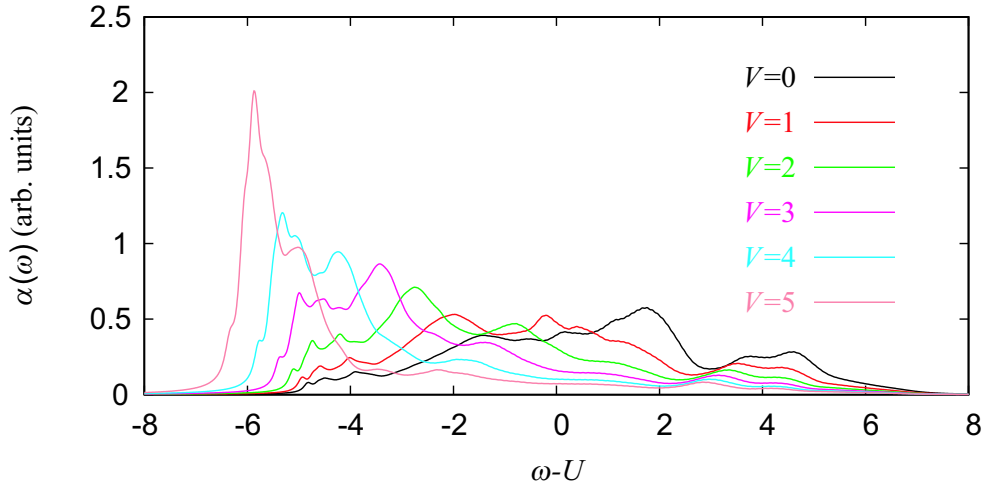


Fig. 3.36. 2次元26サイト、 $U^{-1} = 0.05$  での様々な  $V$  における光吸収  $\alpha(\omega)$ 。 $\epsilon = 0.1$  を用いた。

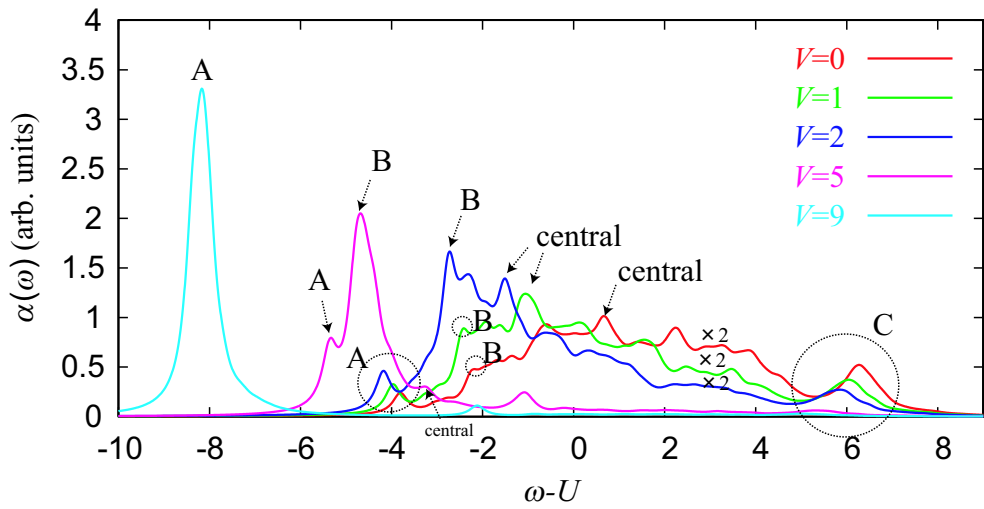


Fig. 3.37. 2次元18サイト、 $U^{-1} = 0.1$  での様々な  $V$  における光吸収  $\alpha(\omega)$ 。 $\epsilon = 0.1$  を用いた。

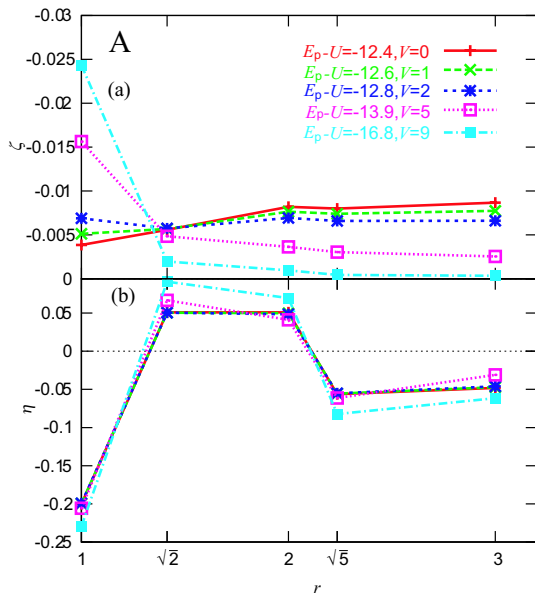


Fig. 3.38. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における Fig.3.37 におけるピーク A のエネルギーでのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

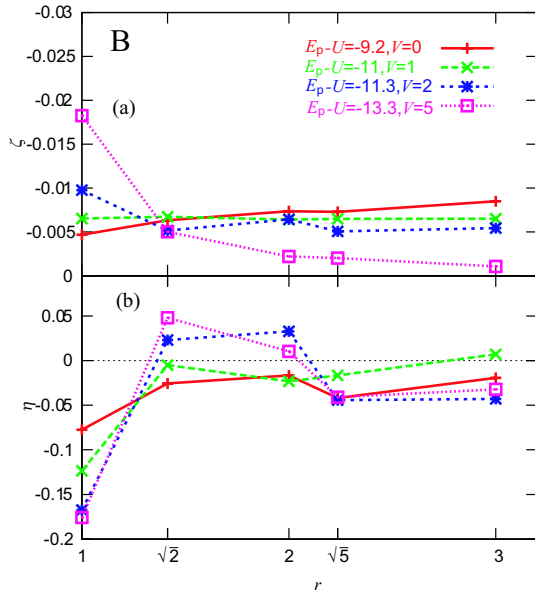


Fig. 3.39. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における Fig.3.37 におけるピーク B のエネルギーでのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

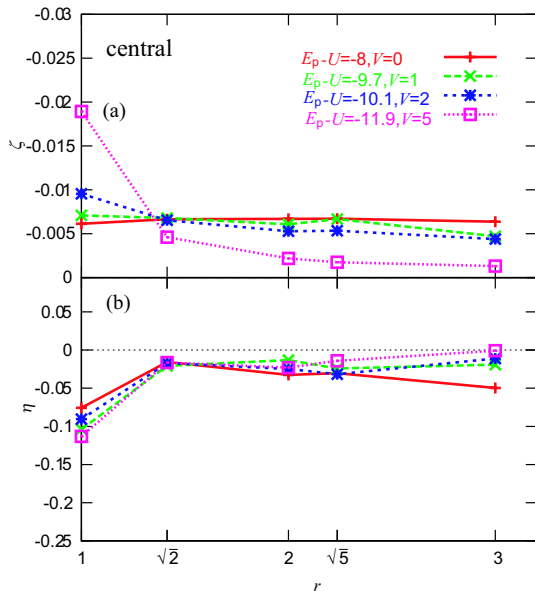


Fig. 3.40. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における Fig.3.37 における central ピークのエネルギーでのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

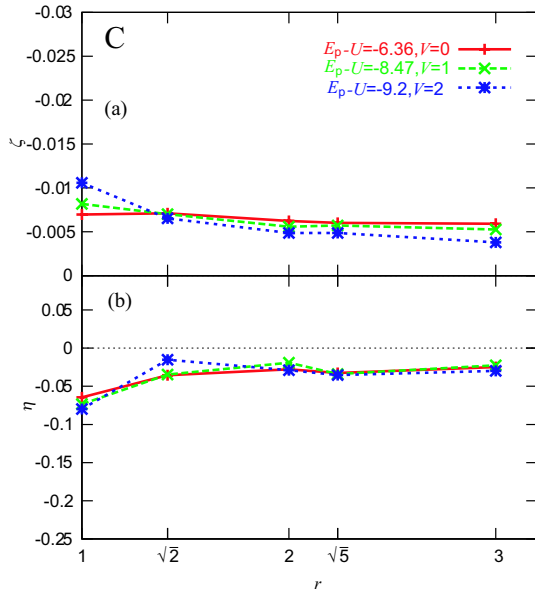


Fig. 3.41. 2次元18サイト  $U^{-1} = 0.1$  における Fig.3.37 におけるピーク C のエネルギーでのエネルギー固有状態の (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。



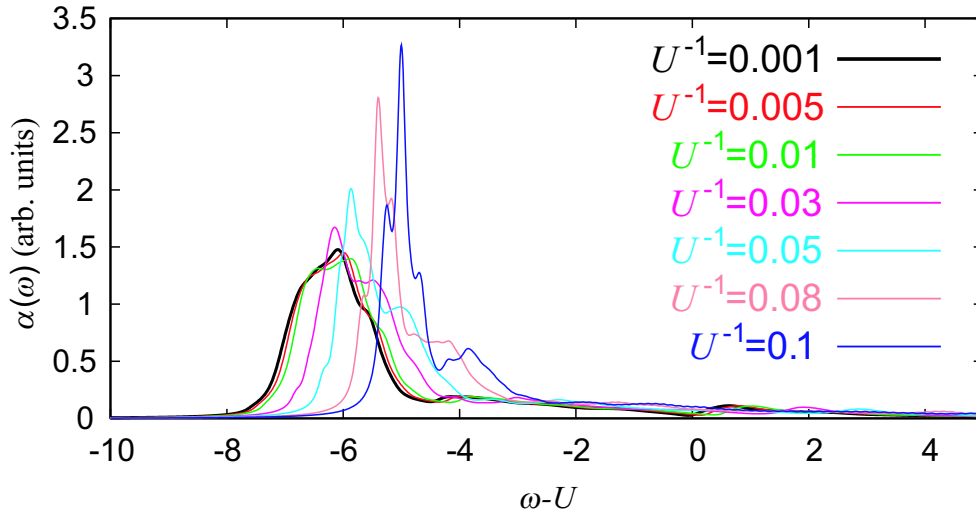


Fig. 3.42. 2次元26サイト、 $V = 5$ での様々な $U^{-1}$ における $\alpha(\omega)$ 。 $\epsilon = 0.1$ を用いた。

さらに、 $U^{-1} = 0.05$ における支配的なピークに寄与するエネルギー固有状態における、最大の遷移モーメントは、同じ $V$ における $U^{-1} = 0.001$ のそれに比べて約40倍以上大きい。このことは、 $U^{-1} = 0.05$ では遷移モーメントが $U^{-1} = 0.001$ に比べて遥かに少ないエネルギー固有状態に集中していることを示している。 $U^{-1} \gtrsim 0.02$ において、 $U^{-1}$ が増加するに従って、それらのピークに寄与するエネルギー固有値の数が減少する。この数の強い $U^{-1}$ 依存性は、エネルギー固有状態の幾つかが、この $U^{-1}$ 領域においてAFスピン秩序を持っていることに起因する。前述したように、基底状態とエネルギー固有状態の遷移モーメントが大きくなる場合は、エネルギー固有状態のスピン構造と基底状態におけるスピン構造が似ている場合と、ダブロンとホロンが最近接サイトに存在している確率を示す $\zeta(1)$ の値が大きい場合であった。この場合は前者の理由により、遷移モーメントが増加する。それゆえ、強いAFスピン秩序を持ったエネルギー固有状態に関しては、AFスピン秩序が破壊された他の状態に比べ、AFスピン秩序を持った基底状態からの遷移モーメントはより大きくなる。遷移モーメントはこれらのAFスピン秩序を持つ状態に集中する。

一方、 $U^{-1} \lesssim 0.01$ において $\alpha(\omega)$ はほとんど $U^{-1}$ に依存しない。これは有効ハミルトニアンにおいて電荷移動項と最近接サイト間相互作用項が支配的であり、 $U^{-1}$ が小さく、 $V$ が大きい領域において両項が $U^{-1}$ に依存していないことによるものである。

### 3.2.3 1次元系

次に、1次元系においても同様に  $\alpha(\omega)$  における  $V$  依存性を求めた。有限の  $V$  の場合においても、 $U^{-1} \lesssim 0.1$  の領域において、 $\alpha(\omega)$  における  $U^{-1}$  依存性は非常に弱いので  $U^{-1} = 0.01$  の結果だけを Fig.3.43 に示す。この図からわかるように、 $V \lesssim 2$  においては、 $V$  が増すにつれて、低エネルギー側のピークが成長するが、変化は小さい。 $V \gtrsim 2$  においては、最低エネルギーピークが支配的となっている。

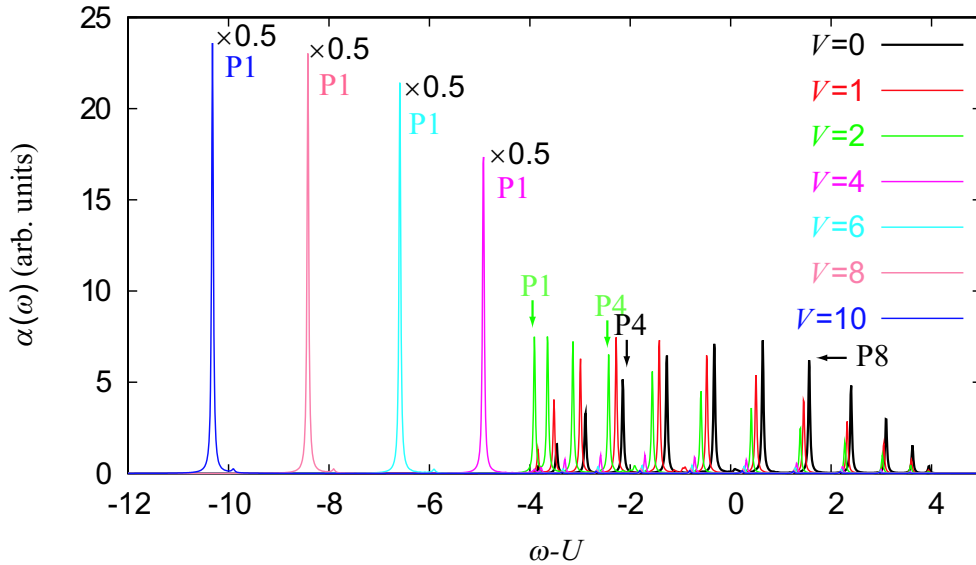


Fig. 3.43. 1次元 26 サイト、 $U^{-1} = 0.01$  において様々な  $V$  における  $\alpha(\omega)$ 。  $\epsilon = 0.1$  を用いた。

1次元系においては、本論文で考察した  $V$  の領域すべてにおいて離散的な光吸収スペクトルが得られた。この離散的な吸収のピークに対応するエネルギー固有状態を計算した。遷移モーメントの数値計算の結果より、 $V$  が有限の場合も、各ピークは一つのエネルギー固有状態への励起によるものであることがわかった。18 サイトの場合、8 個の離散的ピークがあり、最もエネルギーが低い P1 は  $V \gtrsim 2$  で支配的になる。 $V = 0$  においては、バンドの中央にある P4 が最大のピークとなっている。Fig.3.44~3.46 に、1次元 18 サイト、 $U^{-1} = 0.01$  での様々な  $V$  における P1, P4, P8 でのエネルギー固有状態の  $\zeta(r)$  および  $\eta(r)$  を Fig.3.44, 3.45, 3.46 にそれぞれ示す。Fig.3.44, 3.45 および 3.46 より  $V$  増加させるにしたがって  $\zeta(r)$  は大きく変化する。特に Fig.3.44 の低エネルギーピークにおいて変化は大きく、Fig.3.46 の高エネルギーピークにおいては、あまり変化していない。それに対して、電荷が束縛していない場合は、 $\tilde{\eta}(r)$  の値はほとんど変化していないことがわかる。電荷が束縛している場合 (P1 の  $V \gtrsim 4$  は)  $\tilde{\eta}(r)$  はわずかに小さくなっている。さらに、 $V \gtrsim 2$  において支配的なピークとなる P1 に注目すると、 $V$  を増加させるにしたがって  $\zeta(1)$  が増加してゆき、 $V \gtrsim 4$  では、 $\zeta(r)$  の長距離成分がほとんど 0 になっていることがわかる。特に  $V = 2$  付近で急激に  $\zeta(1)$  が大きくなっている。このことより、低エネルギー領域に、 $V \gtrsim 2$  においてダブロンとホロンが束縛

した状態が存在し、この状態は基底状態からの遷移モーメントを独占している。この結果は過去の研究と一致している [18–24]。

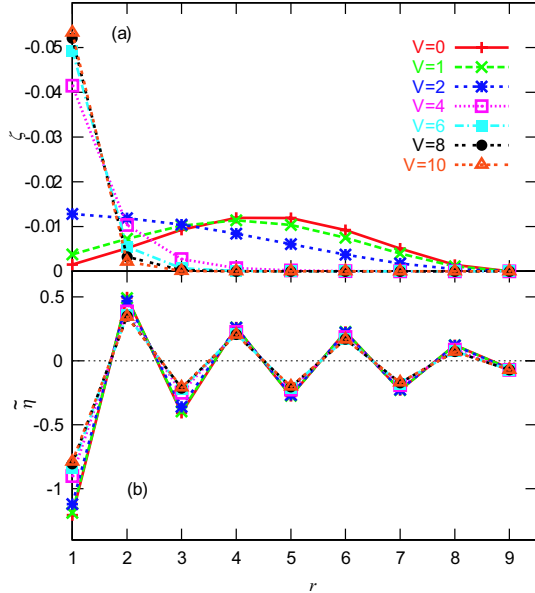


Fig. 3.44. 1次元18サイト,  $U^{-1} = 0.01$  での様々な  $V$  における P1 のエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

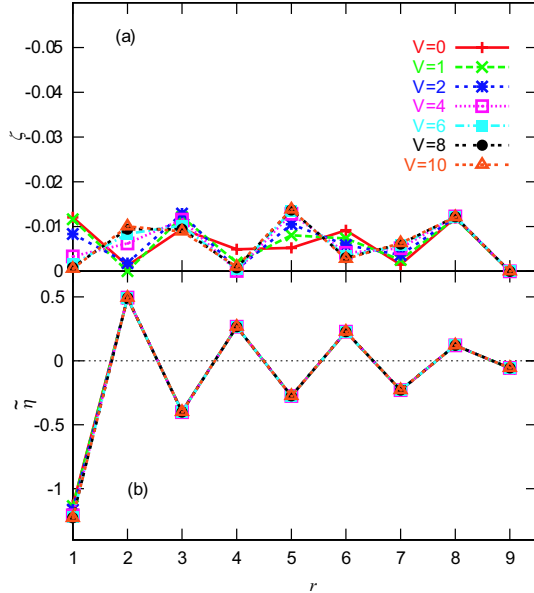


Fig. 3.45. 1次元18サイト,  $U^{-1} = 0.01$  での様々な  $V$  における P4 のエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

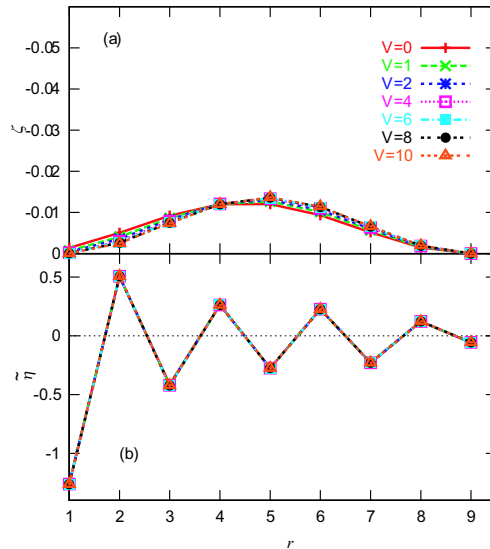


Fig. 3.46. 1次元18サイト,  $U^{-1} = 0.01$  での様々な  $V$  における P8 のエネルギー固有状態の  $\zeta(r), \eta(r)$ 。

さらに、以下に示すように1次元モット絶縁体に特有のスピン・電荷分離に由来する結果を得ている。様々な  $V$  における P1, P4, P8 でのエネルギー固有値の  $\zeta(r)$  およ

び  $\tilde{\eta}(r)$  を Fig.3.47( $V = 0$ ), 3.48( $V = 2$ ), 3.49( $V = 4$ ) および 3.50( $V = 8$ ) に示す。電荷相関関数  $\zeta(r)$  はこれらのエネルギー固有状態間で顕著に異なっているが、Fig.3.44 でみられるようにダブロンとホロンが束縛している時を除いて  $\tilde{\eta}(r)$  はこれらのエネルギー固有状態においてほとんど同一であることがわかる。ダブロンとホロンが束縛した状態におけるエネルギー固有状態の  $\tilde{\eta}(r)$  の絶対値、すなわち AF スピン秩序の大きさは他の状態のよりはわずかに小さい。このスピンと電荷の構造の弱い相関は以下のように理解することができる。ダブロンとホロンが強く束縛されたときに、光励起された電荷の並進運動は強く抑圧される。その結果、光励起された電荷を横切るスピンペアの電荷の運動を通じた間接的な AF スピン-スピン相互作用が働かなくなる。この1点での相互作用の切断の結果、 $\tilde{\eta}(r)$  がわずかに減少する。このような効果はホロン・ダブロンクラスター状態に関連して明らかにされている [53]。それゆえ、この相関は一種の有限サイズ効果だとみなすことができ、これを無視すれば、電荷状態とスピン状態に相関がなく、考察したすべての  $V$  領域 ( $V \lesssim 10$ ) においてスピン・電荷分離が成立することがわかる。さらに、超短パルス励起後のダイナミクスの計算において、1次元 26 サイト、 $U^{-1} = 0.1, V = 4$  での  $\zeta(r, \tau), \tilde{\eta}(r, \tau)$  を Fig.3.51 に示す。この図から  $V \lesssim 10$  において、 $\zeta$  が激しく時間変化しているのに対して、 $\tilde{\eta}$  がほぼ一定であることがわかる。このことからスピン・電荷分離がほぼ厳密に成立していることがわかる。1次元モット絶縁体においては十分大きな  $V$  が導入された場合に一つの電荷束縛状態が遷移モーメントをほぼ独占している。このこと自体は、1次元バンド絶縁体や電子間相互作用が弱い1次元系などの結果と一見同じである [54]。しかしながら、1次元モット絶縁体における電荷束縛状態はスピンを持たない電荷(ダブロン・ホロン)で構成されている。単一の状態が遷移モーメントを独占することはスピン自由度の分離に由来するものであり、1次元バンド半導体や電子間相互作用が弱い系とは全く異なった起源を持つものである。

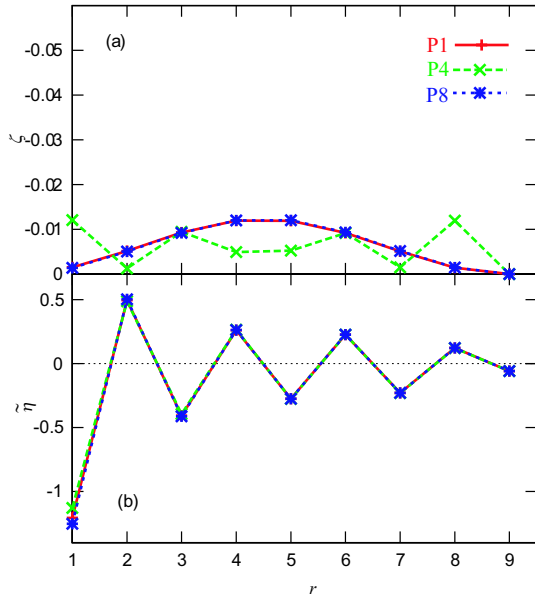


Fig. 3.47. 1次元18サイト  $U^{-1} = 0.01, V = 0$  における P1,P2,P8 でのエネルギー固有状態における (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

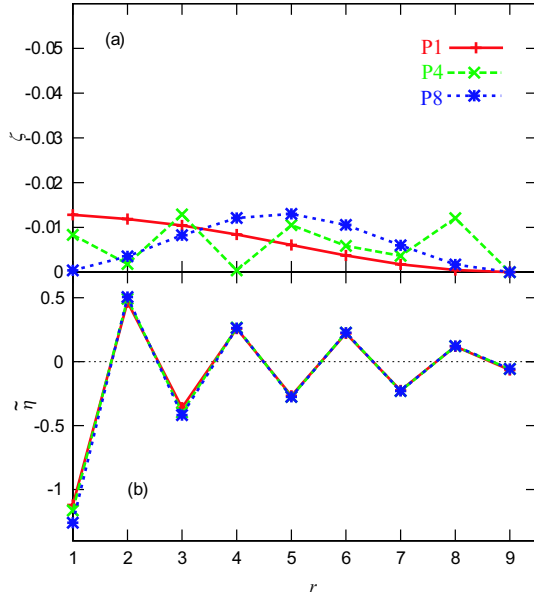


Fig. 3.48. 1次元18サイト  $U^{-1} = 0.01, V = 2$  における P1,P2,P8 でのエネルギー固有状態における (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

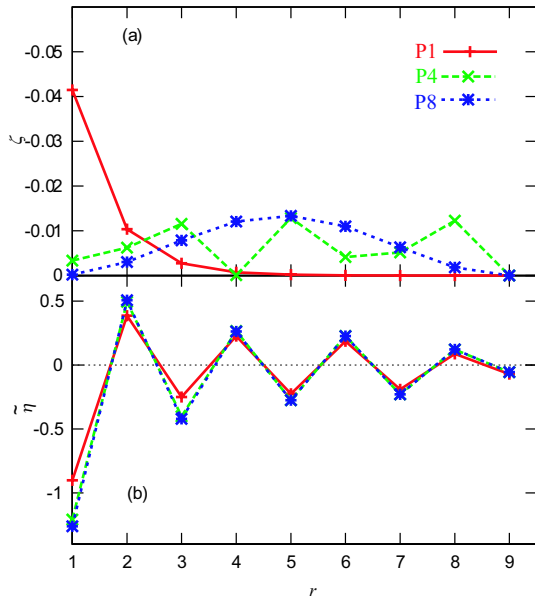


Fig. 3.49. 1次元18サイト  $U^{-1} = 0.01, V = 4$  における P1,P2,P8 でのエネルギー固有状態における (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

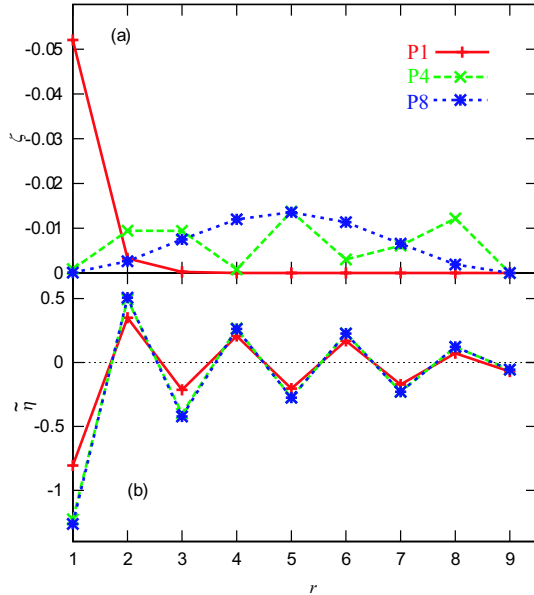


Fig. 3.50. 1次元18サイト  $U^{-1} = 0.01, V = 8$  における P1,P2,P8 でのエネルギー固有状態における (a) $\zeta(r)$ , (b) $\eta(r)$ 。

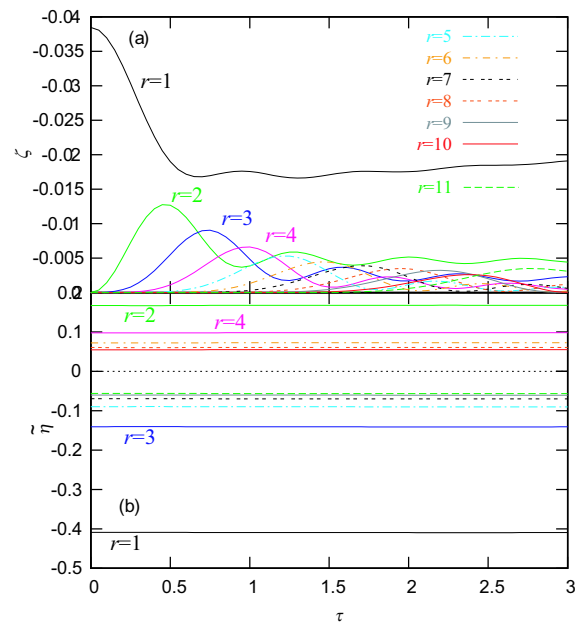


Fig. 3.51. 1次元26サイト,  $U^{-1} = 0.1, V = 4$  での  
 (a)  $\zeta(r, \tau)$ , (b)  $\tilde{\eta}(r, \tau)$  の時間依存性。

## 第4章 結論

2次元モット絶縁体における光吸収スペクトルの研究から以下の結論が得られた。まずオンサイトクーロン相互作用のみを考慮した場合について述べる。非常に相関の強い領域  $U^{-1} \lesssim 0.01$  (エネルギーの単位を  $t$  とした) においては、電荷移動項が支配的になり、ホロンとダブロンの準運動量によってエネルギー固有値が決定される。その結果、ほぼ同じ準運動量をもっているが、異なったスピン構造を持っている膨大な数のエネルギー固有状態がほぼ縮退している。また、すべてのエネルギー固有状態は光生成された電荷の移動によって AF スピン秩序が破壊されるために、AF スピン秩序を持っていない。この準縮退構造の結果、光吸収スペクトル  $\alpha(\omega)$  には約 16 の幅を持った広い吸収帯、および  $\omega \approx U$  に鋭い central ピークが見られる。この central ピークに寄与するエネルギー固有状態は、ホロンが一つの副格子のみに存在し、ダブロンは他の副格子のみに存在する電荷構造を持つ。その結果、これらの状態は基底状態からの巨大な遷移モーメントを持つ。  $U^{-1} \gtrsim 0.02$  領域においては、スピン間相互作用の効果が顕著になり、エネルギー固有値の縮退構造が失われる。その結果  $U^{-1}$  の増加に伴い、central ピーク が不鮮明になる。低エネルギー領域でのエネルギー固有状態のいくつかは AF スピン秩序を持ち、そのエネルギー領域は  $U^{-1}$  が増加するに従って拡大する。

最近接クーロン相互作用の効果に関しては以下の結果が得られた。  $U^{-1}$  の値に関わらず、  $V \gtrsim 4$  において、基底状態が CDW 状態へ変化しない限り、ダブロンとホロンが束縛しているエネルギー固有状態が存在し、  $\alpha(\omega)$  に見られる支配的なピークはこれらの電荷束縛状態への励起によるものである。通常のエキシトン状態と対照的に、  $U^{-1} \lesssim 0.01$  においては膨大な数のエネルギー固有状態が、この支配的なピークに寄与している。これらの状態はほとんど同じ電荷構造を持っているが、スピン構造は異なっており、膨大な状態数がスピン自由度から生じている。また、これらの状態は AF スピン秩序を持っていない。  $U^{-1}$  が増加するに従って、これらの状態のいくつかは AF スピン秩序を持ち始め、この AF スピン状態をもつ状態へ遷移モーメントが集中し始める。  $U^{-1}$  が 0.05 まで増加してもなお、多くのエネルギー固有状態が支配的なピークに重要な寄与をしている。この支配的なピークに膨大な数のエネルギー固有状態が寄与するという結果は、エキシトン状態には見られないものであり、この結果とエキシトン状態の本質的な違いは系全体のスピン自由度と電荷の結合から生じている。またこの支配的なピークに膨大な数のエネルギー固有状態が寄与するという結果は、スピン・電荷分離の結果として 1 つのエネルギー固有状態が光学遷移モーメントを独占する 1次元モット絶縁体における電荷束縛状態とも対照的である。この違いは 1次元と 2次元モット絶縁体における電荷とスピンの自由度の間の結合における違いから生じていると結論づけられる。

このようにして、光吸収スペクトルは、1次元、2次元系における電荷とスピンの結

---

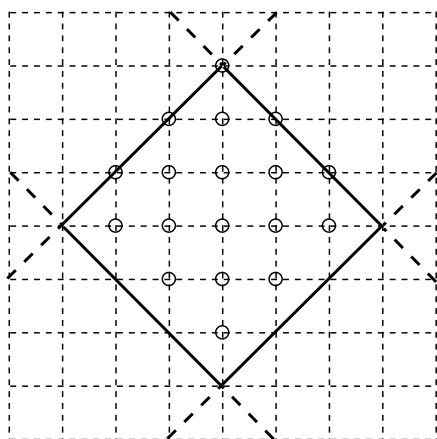
合の違いを敏感に反映し、その相互作用を探るのに適した物理量であることがわかる。



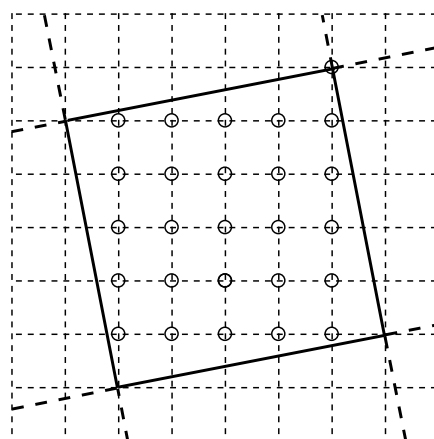
# 付録A

周期的境界条件を満たす、システムサイズ  $N = 18, 26$  におけるクラスターの形状を以下に示す。

## A.1 2次元系

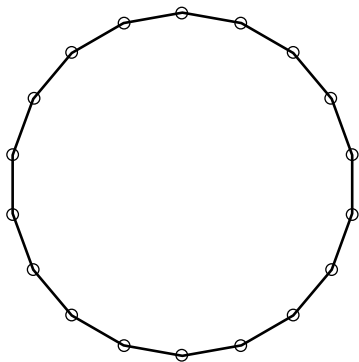


18 site

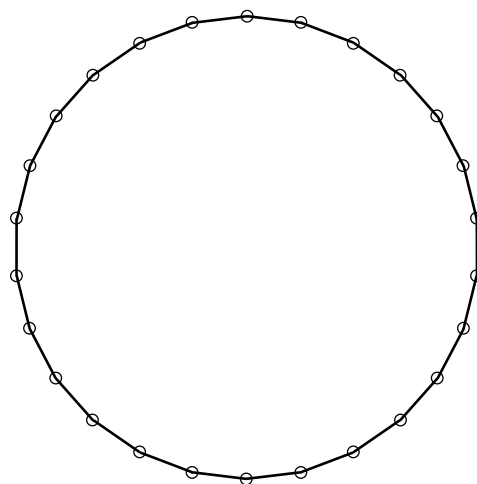


26 site

## A.2 1次元系



18 site



26 site

# 付録B ランチョス法による吸収強度の計算方法

## B.1 ランチョス法

ランチョス法の基本的なアイデアは特定の基底を作ることによりハミルトニアンを3重対角行列に表現し直すことである。まず最初に、ヒルベルト空間における任意のベクトル  $|\phi_0\rangle$  を選ぶ、次に最初のベクトルにハミルトニアンを作用させて新しいベクトルを作る。

$$|\phi_1\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle - \frac{\langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}|\phi_0\rangle, \quad (\text{B.1.1})$$

ここで  $\langle\phi_0|\phi_1\rangle$  は

$$\begin{aligned} \langle\phi_0|\phi_1\rangle &= \langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle - \frac{\langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\phi_0\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{B.1.2})$$

を満足する。ここで複素共役をとれば同様に  $\langle\phi_1|\phi_0\rangle = 0$  であることも確かめられる。そして上記のベクトルを使って新たにベクトルを作る。

$$|\phi_2\rangle = \hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}|\phi_0\rangle, \quad (\text{B.1.3})$$

ここでも同様に、

$$\begin{aligned} \langle\phi_0|\phi_2\rangle &= \langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}\langle\phi_0|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\phi_0\rangle \\ &= \langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \langle\phi_1|\phi_1\rangle \\ &= \langle\phi_1|\phi_1\rangle + \frac{\langle\phi_0|\hat{\mathcal{H}}|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_0|\phi_1\rangle - \langle\phi_1|\phi_1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{B.1.4})$$

$$\begin{aligned} \langle\phi_1|\phi_2\rangle &= \langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle}{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}\langle\phi_1|\phi_1\rangle - \frac{\langle\phi_1|\phi_1\rangle}{\langle\phi_0|\phi_0\rangle}\langle\phi_1|\phi_0\rangle \\ &= \langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle - \langle\phi_1|\hat{\mathcal{H}}|\phi_1\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{B.1.5})$$

が確かめられる。さらに以下のように、循環的に基底ベクトルを定義する。

$$\begin{aligned} |\phi_{n+1}\rangle &= \hat{\mathcal{H}}|\phi_n\rangle - a_n|\phi_n\rangle - b_n^2|\phi_{n-1}\rangle, \\ a_n &= \frac{\langle\phi_n|\hat{\mathcal{H}}|\phi_n\rangle}{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}, \\ b_n^2 &= \frac{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}{\langle\phi_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle}, \end{aligned} \quad (\text{B.1.6})$$

ここで  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  の整数であり、係数  $a_n, b_n^2$  は上記で与えられる。これらは  $\hat{\mathcal{H}}$  のエルミート性などから実数である。補足として  $b_0 = 0, |\phi_{-1}\rangle = 0$  である。この操作を繰り返し、 $n = N+1$  において、初めて  $|\phi_n\rangle = 0$  となったとする。ここで、 $|\phi_n\rangle, n \leq N$  を規格化した

$$|\tilde{\phi}_n\rangle = \frac{|\phi_n\rangle}{\sqrt{\langle\phi_n|\phi_n\rangle}}, \quad (\text{B.1.7})$$

を定義する。ここで  $N_n = \langle\phi_n|\phi_n\rangle$  とする。

$n, m \leq N$  において

$$\langle\tilde{\phi}_n|\tilde{\phi}_m\rangle = \delta_{n,m}, \quad (\text{B.1.8})$$

$$H_{n,m} = \langle\tilde{\phi}_n|\hat{\mathcal{H}}|\tilde{\phi}_m\rangle = 0 \quad |n-m| \geq 2 \text{ の場合}, \quad (\text{B.1.9})$$

が、数学的帰納法を用いると証明出来る。(B.1.8) 式と (B.1.9) を用いると、(B.1.7) 式を基底としたときのハミルトニアン行列は以下ようになる。

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_1 & b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_2 & b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{B.1.10})$$

このような3重対角行列の形にすることができれば Fortran のサブルーチンライブラリーを用いて対角化することができる。

## B.2 スペクトル関数

ランチョス法の特徴は与えられたハミルトニアンの動的な量すなわち、外的な場に対する応答を計算することができるということにある。近年、ランチョス法は動的な量などの計算において極めて強力な計算方法として広く認められている。以下に応答計算のための理論を述べる。我々が注目しているのは、線形応答理論により導かれる以下の方程式で与えられる吸収強度 [16] の問題である。

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \langle \psi_0 | \hat{O}^\dagger \frac{1}{\omega + E_0 + i\epsilon - \hat{H}} \hat{O} | \psi_0 \rangle \right]. \quad (\text{B.2.1})$$

$\epsilon$  は極小さな正の数であり、複素平面においてグリーン関数の極をシフトさせるために導入された、人工的な幅である。演算子  $\hat{O} = \hat{J}$  とすれば  $I(\omega)$  は吸収強度を表す。そこで式 (B.2.1) を完全形:  $\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = 1$  で展開し、

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = P \left[ \frac{1}{x} \right] - i\pi \delta(x), \quad (\text{B.2.2})$$

を用いると

$$I(\omega) = \sum_n |\langle \psi_n | \hat{O} | \psi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - (E_n - E_0)), \quad (\text{B.2.3})$$

のように変形することができる。ここで  $E_n$  は  $\hat{H}$  のエネルギー固有値で、 $|\psi_n\rangle$  は固有値  $E_n$  の固有関数である。

方程式 (B.2.1) を計算するためにランチョス法を用いる。ランチョス法は初期ベクトルを任意に選んでいたが、この場合は

$$|\tilde{\phi}_0\rangle = \frac{\hat{O}|\psi_0\rangle}{\sqrt{\langle \psi_0 | \hat{O}^\dagger \hat{O} | \psi_0 \rangle}}, \quad (\text{B.2.4})$$

ように初期ベクトルを選ぶ。次に行列  $(z - \mathbf{H})$  を考える。行列は  $(z - \mathbf{H})(z - \mathbf{H})^{-1} = \mathbf{I}_0$  の恒等式を満たす。ここで  $z = \omega + E_0 + i\epsilon$  である。 $\mathbf{H}$  は式 (B.2.4) によって定義されている初期ベクトルを用いて式 (B.1.6) で定義される  $|\tilde{\phi}_n\rangle$  を基底とする  $\hat{H}$  の行列表示である。

$$\sum_n (z - \mathbf{H})_{mn} (z - \mathbf{H})_{np}^{-1} = \delta_{mp}, \quad (\text{B.2.5})$$

ここである特定の場合  $p = 0$  を考える。そうすれば

$$\sum_n (z - \mathbf{H})_{mn} x_n = \delta_{m0}, \quad (\text{B.2.6})$$

が得られる。ここで  $x_n = (z - \mathbf{H})_{n0}^{-1}$  であり、この式は  $x_n$  に関する方程式になっており、 $n = 0$  の場合を書き出すと

$$x_0 = \langle \tilde{\phi}_0 | \frac{1}{z - \mathbf{H}} | \tilde{\phi}_0 \rangle, \quad (\text{B.2.7})$$

となる。ここで、この方程式を解くことを考える。解法にクラメールの公式を使うと解は

$$x_0 = \frac{\det B_0}{\det(z - \mathbf{H})}, \quad (\text{B.2.8})$$

となる。ここで  $z - H, B_0$  は

$$z - \mathbf{H} = \begin{pmatrix} z - a_0 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ -b_1 & z - a_1 & -b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & z - a_2 & -b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & -b_3 & z - a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2.9})$$

$$B_0 = \begin{pmatrix} 1 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & z - a_1 & -b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & z - a_2 & -b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & -b_3 & z - a_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2.10})$$

のようになり、係数  $a_n, b_n$  はランチョス法で導入したものである。

次に以下のような行列を定義する

$$D_n = \begin{pmatrix} z - a_n & -b_{n+1} & 0 & 0 & \cdots \\ -b_{n+1} & z - a_{n+1} & -b_{n+2} & 0 & \cdots \\ 0 & -b_{n+2} & z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ 0 & 0 & -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\text{B.2.11})$$

ここで  $D_n$  を用いると  $z - H = D_0$  である。次に  $D_n$  の 1 列目を余因子展開を行うことにより

$$\begin{aligned} \det D_n &= \det \begin{pmatrix} z - a_n & -b_{n+1} & 0 & 0 & \cdots \\ -b_{n+1} & z - a_{n+1} & -b_{n+2} & 0 & \cdots \\ 0 & -b_{n+2} & z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ 0 & 0 & -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ &= (z - a_n) \begin{pmatrix} z - a_{n+1} & -b_{n+2} & 0 & \cdots \\ -b_{n+2} & z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ 0 & -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ &\quad - b_{n+1}^2 \det \begin{pmatrix} z - a_{n+2} & -b_{n+3} & \cdots \\ -b_{n+3} & z - a_{n+3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ &= (z - a_n) \det D_{n+1} - b_{n+1}^2 \det D_{n+2}, \end{aligned} \quad (\text{B.2.12})$$

となる。この関係式 (B.2.12) を使うと  $x_0$  は

$$x_0 = \frac{\det D_1}{\det D_0} = \frac{1}{z - a_0 - b_1^2 \frac{\det D_2}{\det D_1}}, \quad (\text{B.2.13})$$

のようになる。同様の議論より式 (B.2.13) に出てくる行列式の比は一般的に表すと

$$\frac{\det D_{n+1}}{\det D_n} = \frac{1}{z - a_n - b_{n+1}^2 \frac{\det D_{n+2}}{\det D_{n+1}}}, \quad (\text{B.2.14})$$

となり再帰的に係数を作ってゆくことができ最終的には

$$I(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[ \frac{\langle \psi_0 | \hat{O}^\dagger \hat{O} | \psi_0 \rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - a_2 - \dots}}} \right], \quad (\text{B.2.15})$$

を計算すればよいことになる。しかし数値計算においては連分数を無限に計算することは不可能である。したがって有限で計算を打ち切り収束精度を評価し収束精度が十分であれば計算を終了する。

## 参考文献

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [2] T. Ogasawara, M. Ashida, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, Y. Tokura, H. Ghosh, A. Shukla, S. Mazumdar, and M. Kuwata-Gonokami, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2204 (2000).
- [3] M. Ashida, T. Ogasawara, Y. Tokura, S. Uchida, S. Mazumdar, and M. Kuwata-Gonokami, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2831 (2001).
- [4] H. Kishida, H. Matsuzaki, H. Okamoto, T. Manabe, M. Yamashita, Y. Taguchi, and Y. Tokura, *Nature* **405**, 929 (2000).
- [5] H. Kishida, M. Ono, K. Miura, H. Okamoto, M. Izumi, T. Manako, M. Kawasaki, Y. Taguchi, Y. Tokura, T. Tohyama, K. Tsutsui, S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 177401 (2001).
- [6] M. Ono, K. Miura, A. Maeda, H. Matsuzaki, H. Kishida, Y. Taguchi, Y. Tokura, M. Yamashita and M. Okamoto, *Phys. Rev B* **70**, 85101 (2004).
- [7] Y. Mizuno, K. Tsutsui, T. Tohyama, and S. Maekawa, *Phys. Rev. B* **62**, R4769 (2000).
- [8] G. P. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2086 (2001).
- [9] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions, 2nd ed.* (Taylor and Francis, London, 1990).
- [10] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998), and references therein.
- [11] See, for example, H. Haug and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific, Singapore, 1990).
- [12] R. Neudert, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, W. Stephan, K. Penc, N. Motoyama, H. Eisaki, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 657 (1998).
- [13] R. Neudert, S.-L. Drechsler, J. Málek, H. Rosner, M. Kielwein, Z. Hu, M. Knupfer, M. S. Golden, J. Fink, N. Nücker, M. Merz, S. Schuppler, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, M. Domke, and G. Kaindl, *Phys. Rev. B* **62**, 10752 (2000).

- 
- [14] M. Ono, K. Miura, A. Maeda, H. Matsuzaki, H. Kishida, Y. Taguchi, Y. Tokura, M. Yamashita, and H. Okamoto, Phys. Rev. B **70**, 085101 (1981).
- [15] S. Mazumdar and Z. G. Soos, Phys. Rev. B **23**, 2810 (1981).
- [16] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [17] E. Jeckelmann, F. Gebhard, and F.H.L. Essler, Phys. Rev. Lett. **85**, 3910 (2000).
- [18] N. Tomita and K. Nasu, Phys. Rev. B **63**, 085107 (2001).
- [19] F. H. L. Essler, F. Gebhard, and E. Jeckelmann, Phys. Rev. B **64**, 125119 (2001).
- [20] E. Jeckelmann, Phys. Rev. B **67**, 75106 (2003).
- [21] H. Matsueda, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **70**, 033102 (2004).
- [22] F.B. Gallagher and S. Mazumdar, Phys. Rev. B **56**, 15025 (1997).
- [23] F. Gebhard, K. Bott, M. Scheidler, P. Thomas, and S.W. Koch, Philos. Mag. B **75**, 13 (1997).
- [24] F. Gebhard, K. Bott, M. Scheidler, P. Thomas, and S.W. Koch, Philos. Mag. B **75**, 47 (1997).
- [25] W. Stephan and K. Penc, Phys. Rev. B **54**, R17269 (1996).
- [26] Z. Shuai, S.K. Pati, W.P. Su, J.L. Brédas, and S. Ramasesha, Phys. Rev. B **55**, 15368 (1997).
- [27] Z. Shuai, J.L. Brédas, S.K. Pati, and S. Ramasesha, Phys. Rev. B **58**, 15329 (1998).
- [28] S.S. Kancharla and C.J. Bolech, Phys. Rev. B **64**, 085119 (2001).
- [29] W. Barford, Phys. Rev. B **65**, 205118 (2002).
- [30] R.M. Fye, M.J. Martins, D.J. Scalapino, J. Wagner, and W. Hanke, Phys. Rev. B **44**, 6909 (1991).
- [31] D. Guo, S. Mazumdar, S.N. Dixit, F. Kajzar, F. Jarka, Y. Kawabe, and N. Peyghambarian, Phys. Rev. B **48**, 1433 (1993).
- [32] Y. Mizuno, K. Tsutsui, T. Tohyama, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **62**, R4769 (2000).
- [33] W. Stephan and P. Horsch, Phys. Rev. B **42**, R8736 (1990).



- 
- [34] D. Poilblanc, Phys. Rev. B **44**, 9562 (1991).
- [35] E. Dagotto, A. Moreo, F. Ortolani, D. Poilblanc, and J. Riera, Phys. Rev. B **45**, 10741 (1992).
- [36] H. Eskes, A. M. Oles, M. B. J. Meinders, and W. Stephan, Phys. Rev. B **50**, 17980 (1994).
- [37] J. A. Riera and E. Dagotto, Phys. Rev. B **50**, 452 (1994).
- [38] R. Eder, P. Wróbel, and Y. Ohta, Phys. Rev. B **54**, R11034 (1996).
- [39] H. Nakano and M. Imada, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 1458 (1998).
- [40] T. Tohyama, Y. Inoue, K. Tsutsui, and S. Maekawa, Phys. Rev. B **72**, 045113 (2005).
- [41] J.P.Falch, A.Levy, M. A. Kastner, and R.J. Birgeneau, Phys. Rev.Lett. **69**, 1109 (1992).
- [42] H. Okamoto, T. Mitani, K. Toriumi, and M. Yamashita, Phys.Rev. B **42**, 10381 (1990).
- [43] R. F. Peierls: *Quantum Theory of Solids* (Clarendon Press, Oxford,1955).
- [44] A. Takahashi, H. Gomi, and M. Aihara, J. Lumin. **94-95**, 499 (2001).
- [45] A. Takahashi, S. Yoshikawa, and M. Aihara, Phys. Rev. B **65**, 085103 (2002).
- [46] Yutaka Toyozawa, *Optical Processes in Solids*,(CAMBRIDGE).
- [47] A. Takahashi, H. Gomi, and M. Aihara, Phys. Rev. B **69**, 075116 (2004).
- [48] M. Ogata and H. Shiba,Phys. Rev. B **41**, 2326 (1990).
- [49] 鹿兒島誠一、三本木孝、長沢博：「物性科学選書 一次元電気伝導体」, 裳華房 (1982).
- [50] 五味 広喜 学位論文 (2005).
- [51] K. Kusakabe and H. Aoki, Phys. Rev. B **50**, 12991 (1994).
- [52] A. Takahashi, H. Gomi, and M. Aihara, Phys. Rev. Lett. **89**, 206402 (2002).
- [53] Hiroki Gomi, Akira Takahashi, Toshihiro Ueda, Hisashi Itoh, and Masaki Aihara, Phys. Rev. B **71**, 045129 (2005).
- [54] S. Abe, J. Phys. Soc. Jpn. **58**, 62 (1989).

# 謝辞

本論文の研究は、奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究科 物質創成科学専攻 複雑系解析学講座 相原 正樹 教授のご指導のもとに行われたものです。ご指導いただきました相原 正樹 教授には本研究のみならず、進学など様々な局面において多大なるご助言、ご協力を頂きました。ここに、深く感謝の意を表します。高橋 聡助 教授には博士前期課程から5年間にもわたり本研究を先導して頂きました。また、物質科全般における幅広い視野からの理論的解釈及びその考察を含め、研究を行う姿勢など、実に多大なる部分において懇切丁寧なご指導並びにご鞭撻を頂きました事に、深く感謝の意を表します。

凝縮系物性学講座 服部 賢 助教授には、本研究における副指導教官として多大なるご協力をして頂きました。凝縮系物性学講座 大門 寛 教授、量子物性科学講座 山本 愛 士助教授には実験的立場からの貴重な意見、ご助言と本論文の査読をして頂きました。お三方に対して、深く感謝致します。

また、ゼミなどを通して討論並びに適切且つ貴重なご意見を頂いた本講座の稲垣 剛 助手、重城 貴信 助手に深く感謝致します。

本研究において、いくつかのデータを提供して頂きました、博士後期課程修了生の五味 広喜氏に深く感謝します。氏が在学中の時は時間を問わず議論して頂きました。重ねて感謝の意を表します。加えて本講座の方々にも公私ともに非常に多くのご協力を頂きましたことに、ここでお礼を申し上げます。この5年間はよい縁に恵まれ、公私とも充実した研究生生活を送ることができました。

最後に、私の博士後期課程修了まで研究をつづけるというわがまを暖かい目で、文句一つ言わずに見守ってくれた両親に最大限の感謝の意を表したいと思います。

未筆ながら、以上をもって謝辞とさせていただきます。

2006 春  
伊東 久

# 業績一覽

## 論文

- (1) “ Light absorption spectrum of two-dimensional Mott insulators ”, Hisashi Itoh, Akira Takahashi, and Masaki Aihara, Physical Review B. Phys. Rev. B **73**, 075110 (2006).

## 国際学会発表

- (1) “ Effects of long-range coulomb interaction on photoexcited states in strongly correlated electron systems ”, Hisashi Itoh, Akira Takahashi and Masaki Aihara, The International Conference on Dynamical Processes in Excited States of Solids (DPC '03), Christchurch, New Zealand. August 2003.
- (2) “Crossover between photoexcited states characteristic of strongly correlated low-dimensional electron systems and exciton states ” Hisashi Itoh, Hiroaki Furuse, Tetsuo Tomota, Akira Takahashi and Masaki Aihara, The International Conference on Excitonic Processes in Condensed Matter (EXCON '04), Cracow, Poland. July 2004.
- (3) “Photoinduced Mott transition in strongly correlated low-dimensional electron systems ” Hisashi Itoh, Akira Takahashi and Masaki Aihara, International Conference on Luminescence (ICL '05), Beijing, China. July 2005.

## 国内学会発表

- (1) “ 光励起された低次元強相関係のダイナミクスへのエキシトン効果の影響 ”, 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会第 58 回年次大会, 東北大学 2003 年 3 月
- (2) “ 低次元強相関電子系における光励起状態への長距離クーロン相互作用の影響 2 ”, 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会 2003 年秋季大会, 岡山大学 2003 年 9 月
- (3) “ 低次元強相関電子系に固有の光励起状態とエキシトン状態のクロスオーバー 2 ”, 伊東久, 古瀬裕章, 友太哲夫, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会第 59 回年次大会, 九州大学 2004 年 3 月
- (4) “ 低次元強相関電子系に固有の光励起状態とエキシトン状態のクロスオーバー 3 ”, 伊東久, 古瀬裕章, 友太哲夫, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会 2004 年秋季大会,

---

青森大学 2004 年 9 月

- (5) "低次元強相関電子系における光強励起状態のダイナミクス", 伊東久, 福井隆夫, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会第 60 回年次大会, 東京理科大学 2004 年 3 月
- (6) "低次元強相関電子系における光誘起金属転移", 伊東久, 高橋聡, 相原正樹, 日本物理学会 2005 年秋季大会, 同志社大学 2005 年 9 月